



MAGNETISMO Y QUÍMICA CUÁNTICA

Luis Alvarez, PhD en Físicoquímica Molecular

La mayoría de las personas están familiarizadas, en algún grado, con el concepto de magnetismo en la materia. Un objeto magnético (imán) tiene la propiedad de atraer objetos de hierro o acero. En la naturaleza existen magnetos naturales los cuales están compuestos en su mayoría por minerales de hierro del tipo Fe_3O_4 llamado magnetita. Otros elementos tales como el níquel y cobalto también presentan esta propiedad llamada ferromagnetismo. Sin embargo, todas las sustancias muestran un cierto grado de magnetismo, aunque a una escala muchísimo menor que los materiales ferromagnéticos, siendo imperceptible para el humano. Los magnetos también pueden ser preparados en el laboratorio y se llaman magnetos artificiales. El lector también estará familiarizado con los polos norte y sur de un magneto. Los polos se pueden imaginar como los dos extremos del magneto donde el magnetismo está concentrado en su totalidad. Los polos siempre ocurren en pares y son de la misma magnitud (en unidades de tesla); polos iguales se repelen y polos distintos se atraen.

En los libros de texto de física, se describe un material magnético en términos de dominios magnéticos, donde el material está dividido en regiones magnéticas, cada una representando un pequeño imán apuntando en alguna dirección cualquiera. Cuando la mayoría de esos pequeños imanes logran alinearse en una dirección definida, entonces estamos en presencia de una material ferromagnético – el imán común y corriente.

Cuando un imán atrae un objeto de hierro, el imán ha ejercido una fuerza (magnética) sobre ese objeto. Notar que esta fuerza se ejerce “a distancia” y no hay contacto físico entre los dos objetos, de forma similar a como lo hace la fuerza de gravedad sobre objetos que caen. En ambos casos se usa el concepto de campo; campo magnético o campo gravitatorio.

Las leyes de la física que describen las fuerzas magnéticas están bien estudiadas y son parte de cualquier curso básico de electromagnetismo. ¿Qué es lo que produce el magnetismo?. Los campos magnéticos pueden ser producidos artificialmente por corrientes eléctricas en alambres conductores. Esto tiene su explicación a nivel microscópico donde una corriente está asociada con el movimiento de electrones en orbitales atómicos. Solo mencionaremos que esto es parte de una teoría complicada llamada mecánica cuántica que se estudia en cursos avanzados de física.

¿Cuál es el efecto de un campo magnético sobre nuestro cuerpo?. La respuesta es que esencialmente no hay efectos aparentes. Nosotros estamos expuestos a campos magnéticos todo el tiempo – recordar que la tierra es un gran imán. El título del artículo reza “magnetismo y química” y entonces vamos a describir el efecto de un campo magnético sobre las moléculas. Para ello debemos primero hablar sobre un fenómeno físico llamado ley de inducción de Faraday (Michael Faraday, 1791-1867). La figura 1 ilustra el caso macroscópico, donde tenemos un alambre conductor formando un circuito cerrado – espira – conectado a un amperímetro. Cuando movemos un magneto cerca de la espira se produce algo mágico, el campo magnético del imán induce una corriente eléctrica (I) en el circuito formado por el alambre y el amperímetro (recordar que la corriente eléctrica se mide en amperes). Esta corriente persiste solo mientras el magneto esté en movimiento. Lo interesante es que la corriente inducida se genera sin haber contacto físico entre el magneto y el circuito. Hay que recalcar que el circuito

no está conectado a ninguna fuente de poder (pila, batería, etc); el amperímetro solo mide corriente, de hecho, podemos reemplazarlo por una ampollita que se ilumina cuando hay una corriente. Otros científicos ya habían advertido de este fenómeno, pero fue Faraday quien formuló las ecuaciones que lo describen.

Una barra magnética es acercada hacia la espira

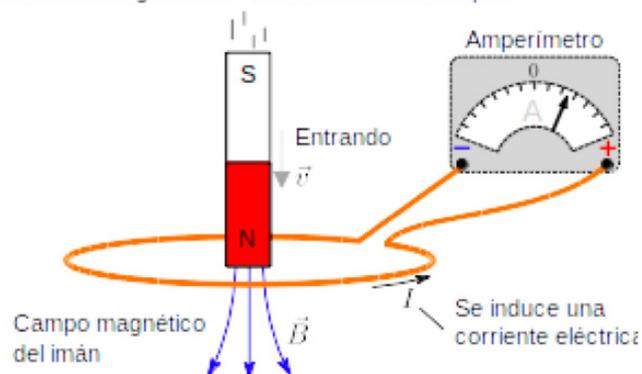


FIGURA 1

Esquema de la ley de inducción de Faraday. Un magneto se mueve en las cercanías de una espira (sin tocarla) y se produce una corriente inducida.

Tal vez el lector ya habrá adivinado que este es el mismo principio de los generadores eléctricos. Un caso muy conocido es el dínamo de una bicicleta (figura 2). Aquí un alambre, enrollado alrededor de un núcleo de hierro (bobina), está en presencia de un imán que gira accionado por la fuerza mecánica ejercida por el ciclista. Entonces se genera – induce – una corriente eléctrica que alimenta una ampollita. La ampollita estará encendida mientras el ciclista siga pedaleando. El mismo principio físico se aplica en una central hidroeléctrica o en un generador eólico. Otras aplicaciones que se derivan de la ley de Faraday son los electroimanes, los motores eléctricos y los transformadores. Dado lo anterior, podemos decir que las consecuencias de esta ley son fundamentales para la vida moderna.

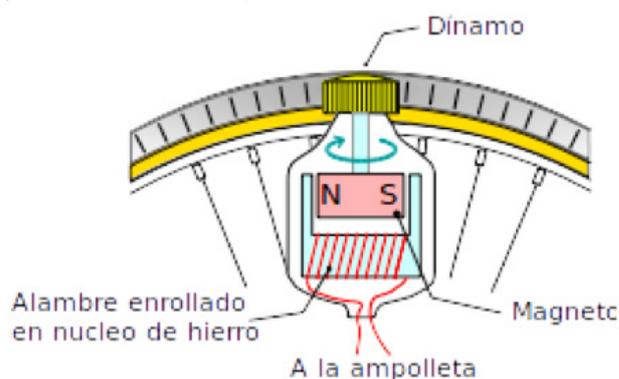


FIGURA 2

La ley de inducción de Faraday explica el funcionamiento de un dínamo. La fuerza ejercida por el ciclista hace girar un magneto tiene como consecuencia la inducción de una corriente que alimenta una ampollita.

Ahora surge la pregunta si la ley de inducción de Faraday es válida o no a nivel molecular, es decir, a nivel microscópico. La respuesta es sí. ¿Pero acaso existen alambres moleculares?. Aquí estamos hablando de distancias muy pequeñas, del orden de ångströms (1 ångström = 0.000000001 metros = 0.1 nanómetros). Cabe mencionar que las leyes de la física a nivel atómico o molecular son misteriosas y son distintas a las leyes

que rigen a nivel macroscópico, en realidad son leyes muy raras y se estudian en cursos avanzados de física o química cuántica. Para aplicar la ley de Faraday debemos tener un circuito cerrado como el de la figura 1. Un circuito molecular puede ser pensado como átomos enlazados entre sí, formado una cadena o anillo que simula un circuito cerrado. El ejemplo típico es el benceno, una molécula muy estudiada en cualquier curso de química general. El benceno – descubierto por Faraday en 1825 – es un hidrocarburo compuesto por seis átomos de carbono y seis átomos de hidrógeno (C_6H_6), formando una estructura exagonal (figura 3). Las líneas que unen los átomos de carbono, en realidad no existen, pero representan enlaces atómicos y dan la idea de formar un circuito cerrado o anillo. El benceno es conocido por los químicos por ser una molécula aromática – en realidad tiene olor. El concepto de aromaticidad en química es muy importante y se aplica a una gran variedad de moléculas cíclicas. Sin embargo, el término aromaticidad solo tiene un origen histórico pues fue concebido a partir del estudio del benceno; de hecho hay moléculas aromáticas que no tienen olor. Otra manera de describir aromaticidad en química es mediante la llamada deslocalización electrónica. Sabemos que los átomos poseen electrones asociados, pero cuando estos átomos se unen o enlazan para formar una molécula, los electrones de cada átomo no necesariamente quedan asociados al átomo original; algunos de estos electrones empiezan a “vagar” dentro de la molécula, entonces se dice que estos electrones están deslocalizados y son libres de moverse dentro de la molécula. El principal interés de los químicos por este tipo de moléculas estriba en que estas poseen una excepcional estabilidad en las reacciones químicas. Surge la pregunta entonces, ¿cómo se podría determinar el grado de aromaticidad de una molécula?. Tal vez el lector estará familiarizado con el término «pH» de una sustancia. El pH es una escala numérica entre 1 y 14 que mide el grado de acidez de una sustancia. En forma análoga se puede crear un índice de aromaticidad de una molécula, basado en la propiedad magnética descrita anteriormente, la ley de inducción Faraday.

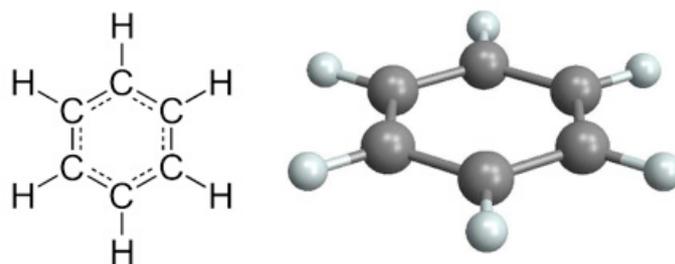


FIGURA 3

La molécula de benceno tiene forma exagonal y está formada por átomos de carbono y hidrógeno. A la izquierda se muestra una representación en el plano; a la derecha se muestra una representación en perspectiva 3D.

Debemos aclarar al lector, que en física o química existen dos metodologías de investigación; una experimental y otra teórica. La experimental involucra equipamiento y a veces grandes recursos económicos. La teórica involucra resolver muchas ecuaciones que modelen el mundo físico o químico. En este artículo hablaremos de un método teórico.

Después de esta larga introducción, vamos a considerar la molécula de benceno como ejemplo y haremos una simulación (estudio teórico) del efecto del campo magnético sobre ella. La teoría que resuelve este tipo de problemas se llama química cuántica, que es la ciencia que describe los fenómenos químicos a nivel molecular. Notar que efectuaremos un experimento virtual, es decir, vamos a resolver ecuaciones muy complicadas que describen las propiedades de la molécula. Para ello se necesitan computadoras de gran rendimiento, que estén dotadas de una gran cantidad de memoria RAM y además posean múltiples procesadores trabajando en paralelo; estos son los llamados

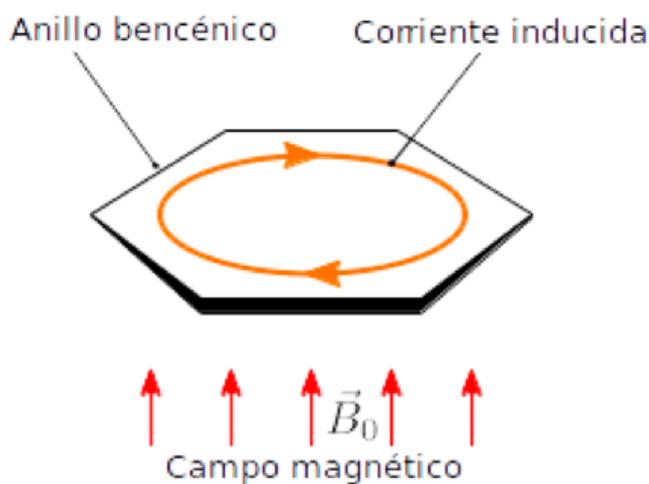


FIGURA 4

Esquema de la molécula de benceno cuando es sometida a un campo magnético (líneas verticales rojas). La ley de inducción de Faraday es válida a nivel molecular, pues se induce una corriente alrededor del anillo.

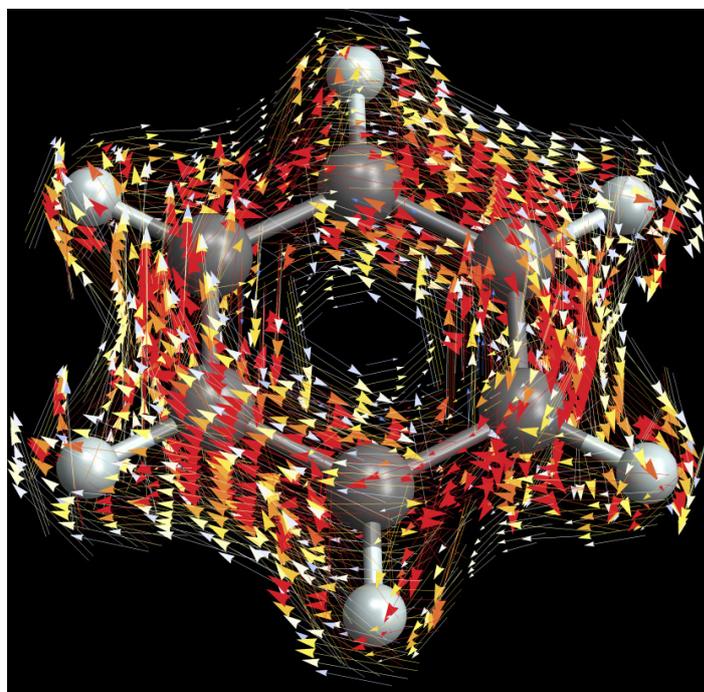


FIGURA 5

Representación 3D del resultado de la simulación computacional. Se pueden observar corrientes (flechas) generadas por la circulación de los electrones móviles de la molécula. Notar que hay dos direcciones, a saber, una exterior en dirección horaria (diatrópica) y una interior en dirección antihoraria (paratrópica).

supercomputadores o clusters de computadores. Dependiendo del tamaño de la molécula, estos cálculos pueden tardar horas, días o hasta incluso semanas.

La figura 4 esquematiza la idea de nuestro experimento teórico. El anillo bencénico forma un circuito molecular análogo al de la figura 1. Según la ley de Faraday, el campo magnético debería inducir una corriente eléctrica en los alrededores de la molécula. Esta corriente no es otra cosa que un flujo de electrones dentro de la molécula. La figura 5 muestra una representación 3D del resultado de una simulación. Da la impresión de que algo está fluyendo dentro de la molécula. Este tipo de representación se llama gráfico de densidad de corriente inducida y muestra patrones de flechas que representan las magnitudes y direcciones de las corrientes inducidas dentro de la molécula. Esto da indicios de que la ley de Faraday es aplicable a moléculas. Pero aquí es donde empiezan las diferencias con el caso macroscópico. En efecto, en la figura 5 se visualizan corrientes en dos direcciones principales: una exterior al anillo, en sentido horario (diatrópica) y una interior al anillo, en sentido antihorario (paratrópica). Es claro que es un poco difícil hacer un análisis de este tipo de gráficos dibujados sobre un papel – en un computador es posible mover y rotar el gráfico 3D a voluntad y visualizarlo desde cualquier punto. Existe una alternativa de visualización que consiste en efectuar “cortes” transversales de la molécula, de forma similar a las tomografías de resonancia magnética nuclear. Lo usual es hacer un corte en el plano molecular – incluyendo los 12 átomos – y otros cortes paralelos a diferentes distancias. Así la estructura 3D puede ser analizada mediante capas 2D. La figura 6, muestra dos casos donde se puede ver, en mayor detalle, la distribución de las corrientes. A la izquierda se muestra un corte transversal en el plano molecular: aquí son

notorias las corrientes diatrópicas y paratrópicas mencionadas anteriormente. A la derecha se muestra otro corte, pero a una distancia de 0.5\AA del plano molecular. Aquí el patrón de corrientes cambia considerablemente, ahora la corriente en sentido horario (diatrópica) es dominante y la paratrópica ha prácticamente desaparecido.

Sin embargo, los gráficos solo representan el aspecto cualitativo de este tipo de estudio. Nos interesa cuantificar las corrientes para poder efectuar comparaciones entre diferentes moléculas (recordar la escala pH). De hecho, estas corrientes también se pueden “medir” o calcular mediante un “amperímetro cuántico”. El valor de estas corrientes es lo que llamamos el índice de aromaticidad. Así, por ejemplo, en el benceno la corriente neta que atraviesa un enlace carbono-carbono es de aproximadamente 12 nA (nanoamperes), una cantidad muy pequeña dado que estamos trabajando con moléculas. El benceno es una de las moléculas orgánicas que tiene el mayor índice de aromaticidad, y por lo general es usado como referencia.

Por lo general, cualquier estudio teórico es mucho más barato que uno experimental. Sin embargo, debemos advertir que el modelamiento teórico de la realidad está aún lejos de obtener resultados 100% satisfactorios. La dificultad estriba principalmente en resolver ecuaciones demasiado complicadas, incluso para los supercomputadores más poderosos del mundo. Para aliviar esta dificultad, se deben hacer simplificaciones a la teoría con el fin de obtener resultados aproximados. A veces esto implica un riesgo, es por ello que el científico experimental tiene que considerar los estudios teóricos solo como referencia, porque le pueden dar ciertos indicios para descartar ciertas rutas y dirigir los esfuerzos a aquellas que podrían ser más plausibles.

En resumen, la ley de inducción electromagnética fue inicialmente formulada por Faraday para casos macroscópicos donde se puedan efectuar experimentos reales. En el caso microscópico esta ley sigue siendo válida, pero hay diferencias notables con el caso macroscópico. Esta metodología teórica está muy de moda hoy en día.

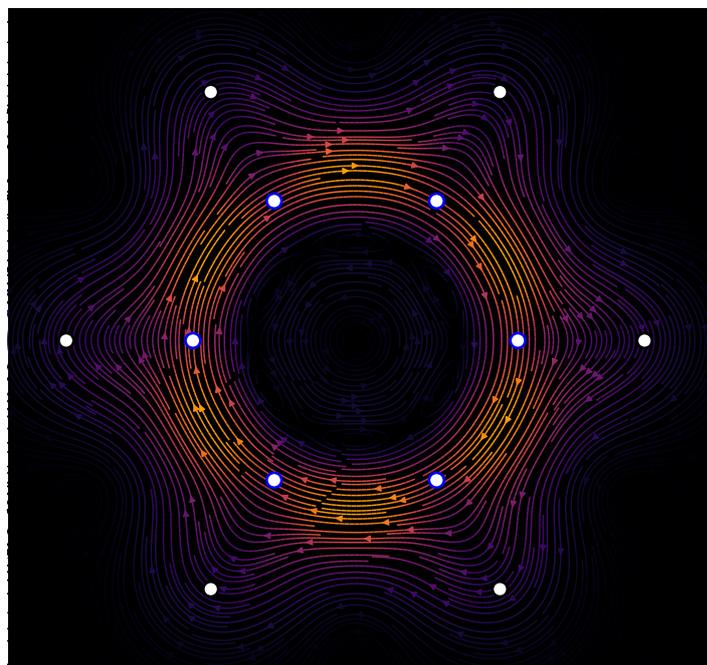
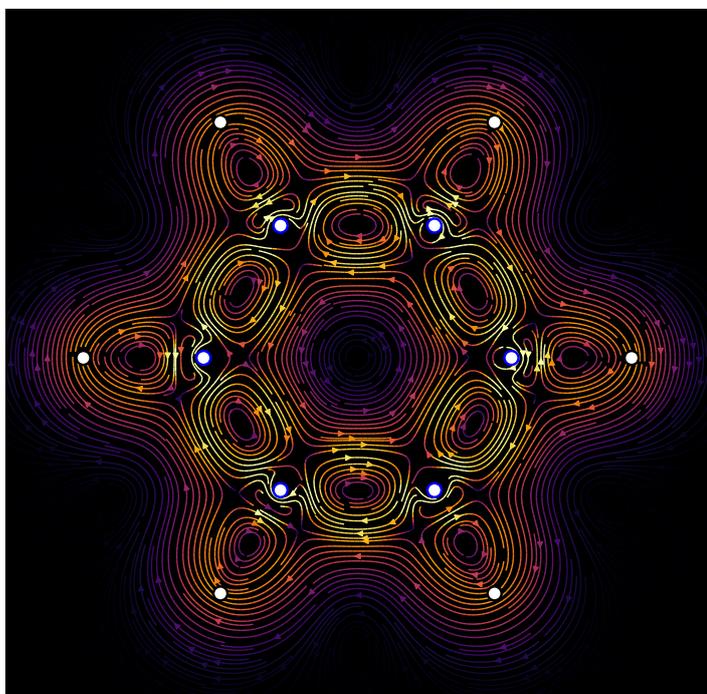


FIGURA 6

A la izquierda se muestra un corte transversal en el plano molecular de la molécula. Notar que hay dos corrientes importantes, una en sentido horario que fluye por afuera, y otra en sentido antihorario que fluye por dentro de anillo. A la derecha se muestra un corte a una distancia de 0.5\AA del plano molecular. El patrón de corrientes cambia considerablemente, ahora la corriente en sentido horario (diatrópica) es dominante.