



H₃⁺

LA MOLÉCULA QUE CREÓ EL UNIVERSO

Luis Alvarez-Thon

Doctor en Físicoquímica Molecular

La molécula H_3^+ es un *ión molecular* que está compuesto por tres átomos de hidrógeno y solamente dos electrones. Esta molécula es considerada como la piedra angular de la Química Interestelar ya que es la iniciadora de reacciones químicas para la generación de moléculas más grandes y complejas [1,2]. De hecho, se supone que H_3^+ fue una molécula fundamental para el nacimiento de estrellas en los momentos iniciales de la formación del Universo. Esta molécula es uno de los compuestos químicos más abundantes en el universo. Sin embargo no se la puede encontrar en concentraciones altas debido a su extrema capacidad de combinación con otras moléculas. Por ejemplo H_3^+ puede reaccionar con un átomo de oxígeno para la producción de agua. Esta alta capacidad de combinación con otros elementos hace difícil su detección en el espacio interestelar. Esto quiere decir que esta molécula en la Tierra no existe en forma natural. El físico J. J. Thomson (premio Nobel de Física, 1906) la descubrió, accidentalmente en 1911, mientras experimentaba con descargas de plasma. El detectó una anomalía en sus datos experimentales, que atribuyó a una especie molecular desconocida que tenía una vida muy corta. Él concluyó que esta molécula podría tener la fórmula H_3^+ o H_3 pero en esos tiempos no existía la tecnología para confirmarlo. La existencia y características químicas de H_3^+ permanecieron desconocidas por muchos años. Las claves para su detección en el medio interestelar fueron dadas recién en 1980 [3]. Esto permitió la detección, por medio de técnicas espectroscópicas, la presencia de H_3^+ en las atmósferas de Júpiter, Saturno y Urano. Posteriormente se la encontró en el espacio interestelar, en la zona central de nuestra galaxia y en otras galaxias más lejanas [1,2,4,5].

En este artículo de difusión, vamos a dar una posible explicación sobre la existencia y corta duración de esta molécula en las condiciones ambientales normales de nuestro planeta. Primero vamos a dar una breve introducción acerca de los conceptos químicos básicos que necesitaremos para entender lo que sigue.

Recordar que cada átomo de hidrógeno está compuesto por un núcleo positivo y un electrón negativo. Es esta diferencia de cargas lo que hace que el electrón se mantenga bajo la influencia del núcleo (cargas de distinto signo se atraen). Este movimiento del electrón se puede entender en analogía al movimiento de la Luna alrededor de la Tierra (figura 1). Sin embargo esta descripción clásica no puede ser tomada como verdadera ya que la descripción correcta está dada por la *Física Cuántica*, la teoría que describe el comportamiento de las partículas más pequeñas de la materia, tales como los electrones, los átomos y las moléculas.

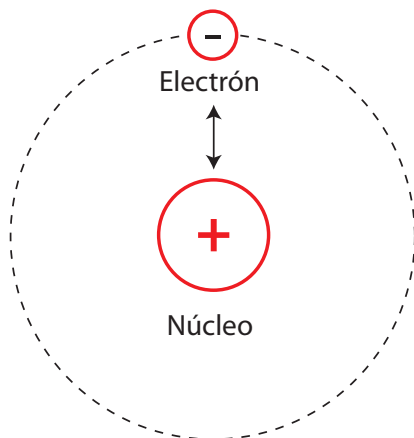


Figura 1

Esquema de un átomo de hidrógeno, donde se hace una analogía con respecto al movimiento de la Luna alrededor de la Tierra.

De acuerdo a los conceptos básicos de química general, para que una molécula poliatómica exista, los átomos que la componen deben tener electrones compartidos —generalmente de a pares— con el objetivo de mantener la estabilidad de la molécula y así evitar la disociación (desarme) de esta. En este sentido los electrones actúan como una especie de *pegamento* para mantener los núcleos relativamente cerca entre sí. Por ejemplo, consideremos la molécula diatómica H_2 (hidrógeno molecular) la cual consta de dos átomos de hidrógeno. Cada electrón de un átomo de hidrógeno, H , es compartido con el otro átomo, de tal forma que hay un equilibrio de fuerzas de atracción (núcleo-electrón) y de repulsión (núcleo-núcleo); la figura 2 muestra un esquema de las fuerzas involucradas. La molécula de hidrógeno, H_2 , al alcanzar el equilibrio mantiene una distancia promedio estable debido a la presencia de electrones entre los núcleos. Decimos “distancia promedio” porque, en realidad, la molécula siempre está vibrando.

Para una molécula compuesta por más de dos átomos, se aplica el mismo concepto descrito para H_2 . En el caso de H_3^+ , su estructura ha sido estudiada extensamente por diversos métodos experimentales y teóricos. La molécula tiene una geometría de equilibrio simétrica formando un triángulo equilátero con una distancia $H-H$ de $0.9\text{\AA}$ (figura 3).

Se sabe que aproximadamente el 99.9% de los átomos en el universo está compuesto por dos tipos: hidrógeno (92.1%) y helio (7.8%) [1]. Es por eso que la química predominante en el universo es protagonizada por el hidrógeno. La producción de H_3^+ es explicada por los químicos por medio de la reacción:

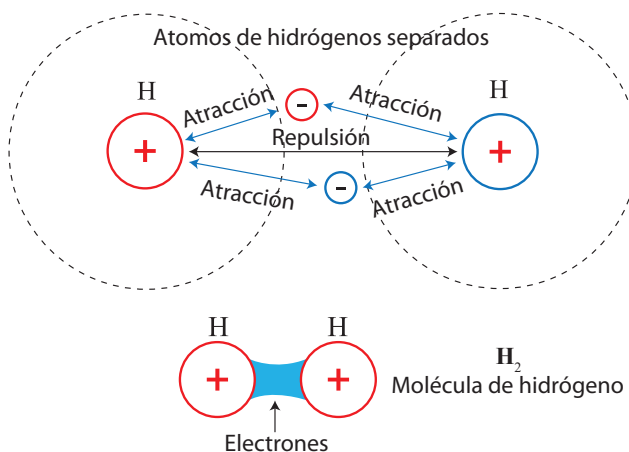
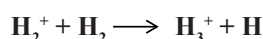


Figura 2

La formación de la molécula de hidrógeno, H_2 . Los electrones son atraídos por los núcleos y los núcleos se repelen entre sí. La estabilidad de la molécula está dado por el equilibrio entre las fuerzas de atracción y repulsión.

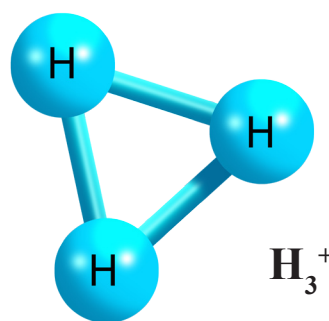
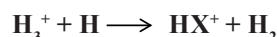


Figura 3

Estructura triangular de la molécula de H_3^+ , con una distancia entre átomos de hidrógeno de $0.9\text{\AA}$. La carga neta de la molécula es positiva porque solo posee dos electrones.

Es decir, la combinación de H_2^+ y H_2 es capaz de producir H_3^+ e hidrógeno atómico H . Para que esta reacción se lleve a cabo, se necesita una gran cantidad de energía, es por eso que la producción de H_3^+ no ocurre de forma espontánea. Por otro lado, la siguiente fórmula química explica la reacción de H_3^+ con otra especie neutra, X



Aquí X puede ser cualquier átomo, ión u otra molécula más compleja. La producción de HX^+ genera a su vez, fácilmente, una cadena de otras reacciones químicas que conducen a la creación de otras moléculas más complejas. Este es el motivo del título de este artículo “La molécula que creó el universo”.

Por las razones explicadas anteriormente, el estudio de H_3^+ ha estado a cargo de astrónomos. La unión de la química y la astronomía ha creado una rama especial de la ciencia llamada *Astroquímica*, la cual se ocupa de estudiar la composición química de la materia en el espacio interestelar. La utilización de telescopios, radio-telescopios y espectrómetros permite la obtención de datos, los cuales son analizados mediante métodos teóricos para la detección y caracterización de especies moleculares exóticas, que solo existen en medios con condiciones extremas de temperatura y bajo la influencia de campos magnéticos y gravedades gigantes.

Debido a que las especies observadas por los astroquímicos no se pueden colocar en un tubo de ensayo, ellos tienen que usar sofisticados métodos teóricos para simular propiedades físicas y químicas para compararlas con los datos observados [6].

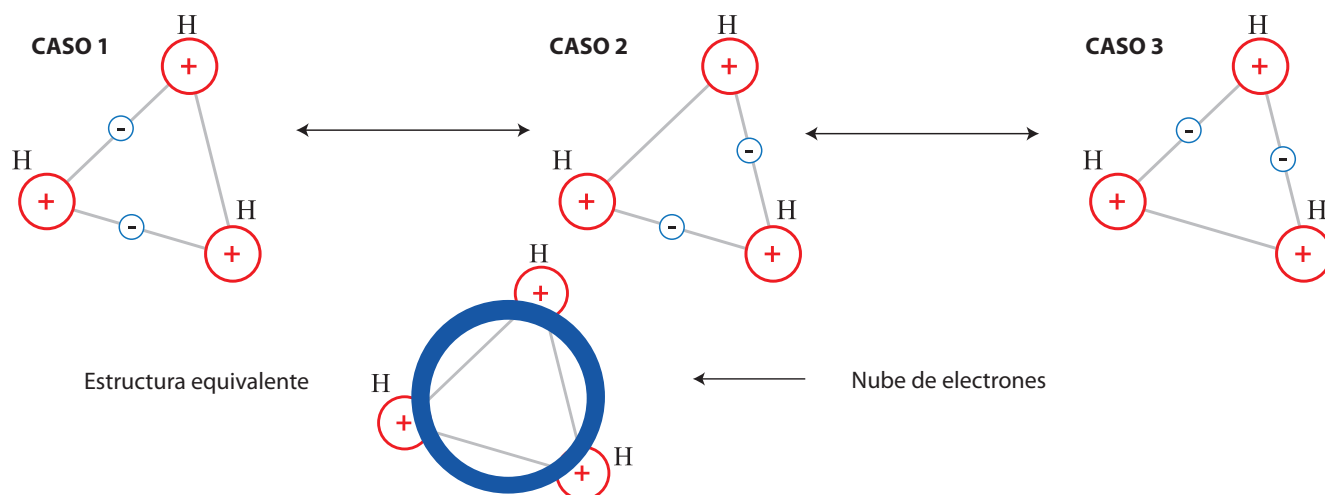


Figura 4

Tres posibilidades para la distribución de dos electrones en la molécula de H_3^+ . Esta estructura resonante explicaría la existencia de la molécula.

En este sentido, la *química computacional* juega un rol fundamental y permite realizar *experimentos virtuales* mediante el uso de la teoría cuántica. Estos cálculos son llevados a cabo usando (super) computadoras de gran rendimiento y dependiendo de la complejidad de la molécula en estudio, los cálculos pueden tomar mucho tiempo (horas, días, semanas o meses).

Revisando la figura 2, la condición ideal es que hayan dos electrones involucrados en el enlace químico para la formación de H_2 . En el caso de H_3^+ surge la duda razonable acerca de la estabilidad de la molécula porque esta posee solo dos electrones. En otras palabras los dos electrones tienen que “arreglarselas” para estar distribuidos uniformemente en el anillo formado por los tres núcleos. ¿Es que acaso los electrones se pueden partir? En ese caso habrían 0.666 electrones entre cada núcleo de H. La respuesta a esta pregunta se podría responder utilizando el concepto de *deslocalización electrónica* estudiado en cursos elementales de química general. Este concepto está respaldado por la *Mecánica Cuántica* y permite a los electrones distribuirse o moverse entre varios centros atómicos. En esta teoría los electrones ya no son considerados necesariamente como partículas sino que pueden ser modelados como una “nube” de carga negativa, la cual tiene la libertad de ocupar todo el espacio con zonas de mayor o menor probabilidad. Sin embargo, mucho antes del establecimiento de la teoría cuántica, los químicos utilizaban el concepto de *sistemas conjugados* para explicar la deslocalización electrónica. La figura 4 esquematiza el sistema conjugado H_3^+ , donde los dos electrones tienen tres posibilidades de distribución. De aquí se genera otro concepto muy importante en química, la *aromaticidad*. Un sistema aromático es una forma especial de deslocalización electrónica. Por lo general las moléculas aromáticas tienen una gran estabilidad y no reaccionan fácilmente con otras moléculas. El caso típico es la molécula de benceno [7].

¿Por qué existe la molécula de H_3^+ ? El concepto de sistema conjugado, mencionado anteriormente, es solo esquemático y no está respaldado por algún índice numérico que permita comparar diferentes moléculas. Por otro lado, la aromaticidad es solo un concepto, o sea, la aromaticidad no puede ser medida experimentalmente; aún así, se la utiliza extensamente. En lo que sigue vamos a describir la aromaticidad de H_3^+ .

En un artículo anterior de esta revista “Magnetismo y Química Cuántica” [7] se describió la influencia de campos magnéticos sobre moléculas. En resumen, cuando una molécula es sometida a un campo magnético externo, ocurre un movimiento de los electrones libres de la molécula. Este fenómeno está basado en la *ley inducción de Faraday*, parte de la teoría electromagnética. La mayor o menos facilidad de movimiento de los electrones indica

el grado de aromaticidad. Los resultados de este tipo de cálculos para H_3^+ son mostrados en la figura 5; se muestran dos representaciones, una 2D y otra 3D. En ambos casos, se observa un flujo de electrones alrededor de la molécula. Esta es una consecuencia del campo magnético aplicado. De acuerdo a este resultado, H_3^+ sería una molécula aromática donde los dos electrones fluyen alrededor de la molécula; en otras palabras, la circulación de electrones forma una corriente eléctrica alrededor del anillo molecular. Si esto no ocurriera, la molécula sería inestable y sería difícil su existencia.

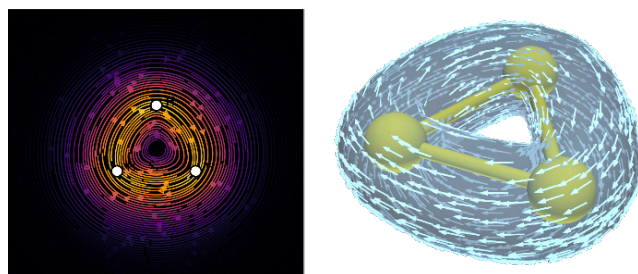


Figura 5

Representación 2D y 3D de la deslocalización electrónica en H_3^+ . La existencia y estabilidad de esta molécula podría ser explicada por el flujo de electrones, formando una corriente eléctrica que circula alrededor del anillo molecular.

Para concluir, podemos decir que la astroquímica es un campo de investigación muy activo en la actualidad. Esta está basada en observaciones astronómicas y complementada por sofisticados cálculos computacionales que permiten corroborar estas observaciones. La búsqueda de nuevas moléculas en el espacio interestelar puede tener un impacto tecnológico importante en el futuro. Hoy está muy de moda el estudio y utilización de materiales tales como el *grafeno*, los *nanotubos* y los *fullerenos*. Si bien estos compuestos fueron descubiertos y fabricados en la Tierra, también se los ha descubierto fuera de nuestro planeta.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] T. R. Geballe and T. Oka, *Nature* 384, 334–335 (1996).
- [2] B. J. McCall, T. R. Geballe, K. H. Hinkle, T. Oka, *Science* 279, 1910–1913 (1998).
- [3] Oka, T., *Phys Rev Lett.* 45 (7): 531–534 (1980).
- [4] Goto, M.; McCall, B.; Geballe, T.; Usuda, T.; Kobayashi, N.; Terada, H.; Oka, T. *Publ. Astron. Soc. Jpn.*, 54, 951–961 (2002).
- [5] Geballe, T. R.; Goto, M.; Usuda, T.; Oka, T.; McCall, B. J., *Astrophys. J.*, 644, 907–913 (2006).
- [6] M. Pavanello, L. Adamowicz, A. Alijah, N. F. Zobov, I. I. Mizus, O. L. Polyansky, J. Tennyson, T. Szidarovszky, A. G. Császár, M. Berg, A. Petrignani, and A. Wolf, *Phys. Rev. Lett.* 108, 023002 (2012)
- [7] Ingeniería al día, “Magnetismo y Química Cuántica”, Vol. 7, N.º1 (2017)