

Perspectivas y Aprendizaje de la Química Física

Lorenzo Pueyo Casaus

Departamento de Química Física y Analítica.

Facultad de Química. Universidad de Oviedo.

lorenzo@carbono.quimica.uniovi.es

La Química Física pretende describir las observaciones experimentales de los fenómenos que interesan a los químicos en el lenguaje de las teorías de la Física. En especial, pretende entenderlos en el contexto de las teorías microscópicas de la materia. En esta charla presentamos una visión personal de la Química Física centrada en su estructura conceptual. Y tras exponer los elementos básicos de esta estructura defendemos las ventajas de incorporar en la formación de los químicos un volumen de conocimiento teórico conforme con el desarrollo de esta ciencia en la segunda mitad del siglo XX.

La estructura conceptual se describe en términos de tres dominios de actividad que lejos de ser recintos aislados, dan lugar a múltiples interacciones y a una ciencia rica, compleja y útil. Estos dominios son la experimentación, la teoría y la simulación.

Si los experimentos son el origen del conocimiento científico y la seña de identidad de la ciencia, las teorías son desarrollos conceptuales que permiten comprender el sentido de los experimentos, generando imágenes coherentes y aceptables de la estructura y funcionamiento del mundo observable. Tales imágenes se expresan en lenguaje matemático y su análisis requiere con frecuencia una gran labor de cálculo. De esta circunstancia nace la simulación como un esfuerzo por crear, evaluar y explotar modelos simplificados basados en el cálculo numérico intensivo y en las poderosas herramientas de visualización que permite la computación actual.

Hablamos, en primer lugar, de los experimentos. Su importancia se ilustra con ejemplos en los que el análisis de la materia puede hacerse a nivel atómico y que requieren ultra-alto vacío, del orden de 10^{-9} milibares. En este régimen el sistema puede examinarse con partículas de dinámica controlable porque el recorrido libre medio molecular es del orden de los centenares de kilómetros. La microscopía electrónica de transmisión (TEM) *in situ* permite observar la muestra a diferentes temperaturas y puede dar imágenes mucho más realistas que las de la TEM convencional. La microscopía túnel de barrido (STM, Gerd Binnig, Heinrich Rohrer, Christoph Gerber y Edmund Weibel, 1982), basada en el efecto túnel cuántico, y la microscopía de fuerza atómica (AFM, G. Binnig, Ch. Gerber y Calvin Quate, 1986) permiten obtener imágenes de la muestra con resolución de 10^{-9} metros. La primera requiere que la muestra sea conductora para que se produzca el efecto túnel. La segunda mide fuerzas del orden de 10^{-18} Newtons entre la muestra y la sonda midiendo la reflexión de un haz láser que incide sobre el soporte de la sonda. Puede aplicarse a semiconductores y aislantes. La fuerza medida caracteriza los potenciales de interacción interatómicos, que pueden así investigarse en sus regímenes de corto, medio y largo alcance gracias a los diferentes modos de trabajo del microscopio. La relevancia de estas medidas es difícil de exagerar y su impacto en el conocimiento de la materia ha sido revolucionario. La AFM ha dado lugar a una amplia familia de microscopías de fuerza que son capaces de medir elasticidad, adsorción, características magnéticas del material, etc. Como ejemplo de gran interés en química se describe un análisis TEM-*in situ* de la síntesis del NH_3 a partir de N_2 y H_2 en presencia de rutenio soportado por nitruro de boro y mejorado con óxido de bario. La comprensión de los mecanismos cinéticos de la catálisis heterogénea ha dado un salto de gigante gracias a la acción combinada de estas nuevas microscopías, el análisis de rayos X, la preparación de catalizadores de muy baja complejidad y el poder de la simulación computacional.

Un segundo grupo de ejemplos se refiere a la acción láser, especialmente la de los láseres pulsantes en el régimen de 10^{-15} segundos y la de los láseres de alta intensidad. En química, los primeros

han abierto la posibilidad de estudiar reacciones con un detalle que permite hablar de *química estado a estado* porque los reactivos pueden prepararse en estados electrónicos, vibracionales y rotacionales determinados y los productos pueden detectarse con igual precisión. Ahmed Zewail recibió el Premio Nobel de Química de 1999 por sus extensas investigaciones sobre la reactividad con espectroscopía de femtosegundo. En este régimen surgen nuevos conceptos y fenómenos imposibles de imaginar desde la perspectiva macroscópica.

Los láseres de alta intensidad ($10^{14} - 10^{15}$ vatios/cm²) abren otro extenso mundo en el que los estados electrónicos se deforman por la acción de los fotones de alta energía, la geometría molecular se altera, la ionización se produce en diferentes puntos de la molécula, surgen explosiones coulombianas que emiten electrones con energías de centenares de electronvoltios, etc. A mayores intensidades aparece el régimen relativista en el que los electrones alcanzan los 10^9 electronvoltios. Conseguir mayores intensidades hará del láser de muy alta intensidad una tecnología capaz de examinar fenómenos que hoy sólo se pueden estudiar en los grandes aceleradores de partículas. Parece obvio que la comprensión de estos experimentos requerirá del quimicofísico un buen conocimiento de muy variadas teorías físicas.

Tras discutir estos ejemplos de nuevos experimentos comentamos la estructura de las teorías básicas que conforman la Química Física: Termodinámica, Mecánica Estadística, Mecánica Cuántica y Cinética y Dinámica. Cada una de ellas tiene sus requisitos matemáticos propios, que se señalan brevemente.

La Termodinámica es la ciencia macroscópica que analiza relaciones entre un número reducido de variables sugeridas por los sentidos y que obtiene resultados de gran generalidad a partir de tres principios básicos justificados por la experiencia. Es también una estructura lógica de producción de conocimiento seguro sobre la conducta de la materia y la radiación, con una brillante historia de inspiración y apertura de nuevas concepciones. A los intentos de comprender su Segundo Principio debemos la aparición de la Mecánica Estadística de Gibbs y Boltzmann. Al análisis termodinámico de la radiación térmica, el nacimiento de la cuantización de la radiación y la Mecánica Cuántica. No es, ciertamente, una ciencia sólo del siglo XIX. En la charla se aportan ejemplos brillantes de saltos conceptuales grandiosos en la segunda mitad del siglo XX, como el descubrimiento de las temperaturas Kelvin negativas por Ramsay, Purcell, Pound y Bloch, o la interpretación de las medidas radiotelescópicas de Penzias y Wilson como una señal de la radiación de fondo de microondas, que dió carta de naturaleza a la teoría cosmológica del *Big Bang*, en 1965. Se comentan ejemplos que muestran el papel crucial de la Termodinámica en distintas áreas emergentes: la deducción muy precisa de propiedades termodinámicas a partir de la Mecánica Cuántica, el poder del análisis combinado termodinámico y computacional en las ciencias de la Tierra, o las múltiples conexiones lógicas entre el formalismo termodinámico general y las leyes del enmarañamiento cuántico. De estos ejemplos se llega a una propuesta para los contenidos mínimos de Termodinámica en la formación del químico, que podrían muy bien ser comunes a la de físicos, matemáticos e ingenieros.

Hablamos después de la Mecánica Estadística como teoría que interpreta las observaciones macroscópicas a partir de la conducta de las partículas constitutivas, los estados cuánticos accesibles y los requisitos de población impuestos por la teoría cuántica. Su riqueza conceptual se manifiesta en sus múltiples formulaciones y en su variado lenguaje físico y matemático, que le otorgan un profundo poder formativo. Comentamos la influencia que han ejercido los desarrollos de esta ciencia en múltiples problemas de interés químico, desde la reactividad a las transiciones de fase. También mostramos ejemplos de trabajo reciente: la descripción del colectivo gaussiano, en la línea metodológica de Gibbs, y el análisis estadístico de la interacción sonda-muestra en microscopía de fuerza atómica. El químico encuentra útil esta ciencia en muchos campos familiares: la estructura de los gases, líquidos y sólidos y sus múltiples transiciones, la naturaleza del equilibrio químico, el proceso de reacción, la conducta de los electrones en los sólidos, el transporte de energía, materia y

carga eléctrica, la electroquímica, la adsorción y la ciencia de las superficies, etc. Como en el caso de la Termodinámica, proponemos un contenido mínimo de Mecánica Estadística en la educación del químico.

Pasamos luego a la Mecánica Cuántica, teoría microscópica universal de la materia y la radiación, capaz de describir con precisión asombrosa la estructura de átomos, moléculas y sólidos, por citar los campos de mas interés en química. Pero también ciencia fundamental en óptica, física nuclear, partículas elementales e información cuántica. En química, esta nueva mecánica se convierte en química cuántica al concentrarse en la explicación de la estabilidad de átomos y moléculas, sus variadas espectroscopías, la formación del enlace químico y su rotura en los procesos reactivos, etc. Todo el programa requiere, además, una notable tarea interpretativa y un trabajo de creación de conexiones entre sus resultados y el lenguaje químico clásico, lleno de conceptos precuánticos muy útiles y muy difundidos.

El desarrollo de la computación de alto rendimiento ha producido un nuevo escenario en química cuántica conocido como química computacional. La disponibilidad de elaborados códigos y computadores de alta capacidad ha permitido el estudio cuantitativo de numerosas moléculas con precisión química. Quedan las macromoléculas, los sistemas altamente correlacionados y los metales pesados, entre otros muchos, como fronteras a conquistar. Y quedan también muchos problemas por entender, gracias a la inmensa complejidad del más humilde de los problemas químicos. Varias metodologías computacionales han sido aceptadas de buen grado por los químicos experimentales, que las utilizan cada vez con más frecuencia en su trabajo, en colaboración con quimicofísicos. Todos estas circunstancias apoyan la necesidad de ofrecer una formación robusta en el pensamiento cuántico a todos los químicos.

Discutimos finalmente algunos aspectos de la Cinética Química y la Dinámica Molecular. A la gran riqueza experimental del estudio de la reactividad, con la medida de velocidades de reacción de procesos ultra-rápidos, la técnica de haces moleculares cruzados y la citada química estado a estado, corresponde un desarrollo paralelo de teorías concurrentes. El químico que pretende entender los detalles de los brillantes experimentos modernos en Cinética Química debe estar familiarizado con la Mecánica Clásica, que aparece en el tratamiento de las colisiones y en el cálculo de trayectorias, la Mecánica Estadística, origen de teorías y conceptos como el estado de transición, objeto clave de la reactividad química, y la Mecánica Cuántica, que aporta el lenguaje del mundo atómico y sus estados, así como las técnicas para calcular las magnitudes observables. La Cinética Teórica o Dinámica Molecular es un claro ejemplo de la amplia y profunda formación que necesita el químico para comprender lo que descubre al adentrarse en los procesos de intercambio atómico y electrónico entre moléculas y agregados moleculares.

La charla concluye con una reflexión sobre desarrollos esperables en nuevos experimentos con resolución atómica, nuevas teorías, nuevas herramientas de simulación deducibles del vigoroso desarrollo de la computación y nuevas y excitantes áreas de interacción entre campos variados, incluyendo las esperables y deseables nuevas oportunidades para los químicos en territorios como la preparación y caracterización de nuevos materiales, la protección del Medio y las ciencias de la Tierra y de la Vida. Y todo sin olvidar que los desarrollos más luminosos y los descubrimientos mas influyentes aparecen, frecuentemente, al margen de los pronósticos mas astutos.

Las referencias citadas en la charla se recogen en el fichero de diapositivas [qfcolegio05.pdf](#), disponible, como este texto, [qfcolquim05.pdf](#), en la página de nuestro grupo: <http://web.uniovi.es/qcgg/>.