

ARTÍCULO

LOS MATRIMONIOS DE LA QUÍMICA

Carlos Amador Bedolla y Miguel Costas
Facultad de Química, UNAM

Los matrimonios de la Química

La ciencia nació sin familia. Pero en cuanto empezó a tener hijos, éstos se fueron separando por apellidos: casas grandes y casas chicas; legítimos y espurios; teóricos y experimentales. En fin, todas esas separaciones de una buena dinastía. Sin duda, una de las casas más prestigiosas de la ciencia es la casa de la Química, con sus Orgánicos, Inorgánicos y Analíticos, por mencionar sólo algunos pocos. Pero es bien sabido que hay otras casas, al menos igualmente prestigiosas: la casa de los Físicos —con Relativistas y Clásicos, Estadísticos y de Estado Sólido— y la de los Biólogos —con Botánicos y Zoólogos, Celulares y Genéticos—, son algunas de las más conocidas. Y como en todas las casas dinásticas que se respetan, entre las casas de la ciencia hay relaciones, oficiales y secretas. Así, la Química se ha involucrado —tanto en matrimonios públicos como en amoríos inconfesables— con la Física, la Biología y con muchas otras casas de incluso más dudosa estirpe.

La Química y la Física nacieron, como algunos héroes de Shakespeare, marcadas por las estrellas. Al producto de su primer romance, la Termodinámica, siguió uno de sus primeros matrimonios oficiales. Todavía discutimos si sus hijos llevan los apellidos en un orden o en el otro, es decir, si se llama Físico-Química o Química-Física.¹ Ese primer matrimonio tuvo lugar luego de que los físicos aceptaron —¡por fin!— la existencia de los electrones, apenas al iniciar el siglo XX. Entonces, el empleo de las ideas centrales de la Física empezó a modificar el nivel de comprensión de los detalles más intrincados de la Química. Como cuando sirvió para descubrir y entender la organización básica de los átomos con sus núcleos —esas regiones minúsculas de altísima densidad—, sus electrones —esas zonas despobladas inmensas— y la existencia de efectos cuánticos. Y que terminó en la desconcertante declaración de Dirac de que, luego de encontrada la ecuación de Schrödinger, a fin de cuentas, “las leyes físicas fundamentales [...] de la totalidad de la química se conocen ahora por completo”. Y el resultado de ese matrimonio ha visto sus frutos más logrados en los últimos años, cuando ese maridaje se combinó con la existencia del periodo de crecimiento tecnológico más grande que ha visto la humanidad, en la forma de la tecnología computacional, que hizo posible que ahora, en efecto, las leyes físicas fundamentales referidas por Dirac, puedan aplicarse a sistemas químicos completos y permitan la realización —que ya no una esperanza— de la Química computacional.

Sin embargo, nos ocupa ahora otra casa real fundada por la Física y la Química. Ésta es la responsable de los avances más recientes de la Química, que la han potenciado a posibilidades inesperadas hace pocos años: la aplicación de tecnología física al arsenal de la Química analítica. La Química empezó en un laboratorio que estudiaba cosas del tamaño de lo humano. Sus técnicas y sus aparatos actuaban también a esa escala: retortas, vasos de precipitados, matraces Kitasato o Erlenmeyer, tubos de ensaye y placas de toque. Con esos humildes

orígenes empezó la grandiosa historia de la Química Analítica que, a fin de cuentas, trata de saber qué y cuánto: qué sustancia es la que nos ocupa y cuánto de ella tenemos en nuestra muestra. La “vía húmeda” —la “marcha de los cationes”, por ejemplo, como recordará cualquier estudiante de Química—permite la identificación de sustancias, pero no es muy efectiva en obtener resultados cuantitativos. Y aquí es cuando llegó la Física, que ya estaba bien preparada para ayudar a su cónyuge. Sin intención ni planeación, los descubrimientos que permiten las observaciones cuantitativas que la vía húmeda de la Química no alcanza y que fundamentan la Química Instrumental, habían sido realizados en el siglo XIX: la relación carga-masa (masas), la interacción radiación-materia (IR, UV, RMN), los rayos X, la celda galvánica/voltaica (electroquímica), etcétera; técnicas todas ellas que ocurren en escala microscópica. Pero lo que caracteriza la modernidad es el increíble avance tecnológico del último medio siglo, que ha permitido que estas técnicas se especialicen para alcanzar las posibilidades actuales.

Tomemos el ejemplo de la Resonancia Magnética Nuclear, que es ahora la mejor manera que tenemos de determinar la estructura molecular de una sustancia —y permite incluso cuantificar la concentración. La forma que tenemos de decidir, por ejemplo, cuál de dos tautómeros de casi la misma estructura y estabilidad está presente en tal solvente, y en qué solvente será el otro el más estable. Cuando estas técnicas se empezaron a aplicar, la resolución de los resultados —limitada por la frecuencia de resonancia del protón que, a su vez, depende del campo magnético del aparato— era de 40 MHz. Los primeros aparatos comerciales ampliamente usados en los laboratorios de investigación y desarrollo de la Química tenían frecuencias de 60 MHz. En la actualidad, los laboratorios de investigación no pueden funcionar con menos de 400 MHz, pero no es tan escaso un aparato de 600 ó 700 MHz —sobre todo cuando la casa de la Química se junta con la de la Biología y se quiere aplicar este hijo de la casa de la Física para detectar cómo están acomodados los átomos en proteínas o en el DNA. El récord actual es de una frecuencia de resonancia de 1GHz.² La casa de la Química, al discutir qué es exactamente lo que vamos a aprender gracias a este nuevo aparato, ha mencionado la posibilidad de observar —indirectamente, desde luego— detalles de la catálisis de las reacciones químicas.

El avance de las posibilidades de la RMN, que se multiplicó por treinta en los últimos cincuenta años, con todo y ser extraordinario, no es exclusivo de esta técnica. Pero ejemplifica dos cosas importantes: el tamaño de los avances que nos han llevado a las posibilidades actuales de la Química y las relaciones entre las casas reales, porque como menciona Sánchez-Ferrando:³

...[H]acia principios de los años cincuenta, toda la teoría de la RMN había sido desarrollada por los físicos, que progresivamente fueron perdiendo interés por un fenómeno ya tan bien conocido. Y, de modo casi natural, el interés se desplazó a la química... En palabras de Packard, “chemists got the point very quickly, thanked the

physicists, and took over”.

Otras técnicas han tenido avances incluso más importantes. Como mencionamos anteriormente, la posibilidad de hacer Química teórica está planteada desde 1930. Pero llevarla a cabo era imposible, sin contar con una forma eficaz de hacer los intrincadísimos cálculos requeridos. Una parte de ese problema la resolvieron los químicos al aplicar las Matemáticas para desarrollar los algoritmos necesarios —y crear también nuevos descendientes en otra casa real, la de la Química Matemática—, pero puede argumentarse que la mayor parte de este logro viene de la técnica, originalmente fundada por los físicos, que ha tenido el mayor progreso en la historia de la humanidad: la computación electrónica. Como se sabe, la computación electrónica puede situar su origen en la invención del transistor —Premio Nobel de Física 1956—, que permitió la creación de microprocesadores a partir de 1971. Los primeros microprocesadores contenían unos dos mil transistores. Se ha llamado Ley de Moore a un resultado de la cuenta del número de transistores presentes en el microprocesador más eficaz como función del tiempo, en particular al hecho de que desde 1971 cada dieciocho meses se duplica esa cuenta. De esta manera hemos llegado en la actualidad a microprocesadores con dos mil quinientos millones de transistores;⁴ un aumento de más de un millón de veces en la capacidad de cómputo en cuarenta años, que ha hecho posible una parte del sueño de Dirac: la Química computacional existe.

Un matrimonio más reciente de la Química fue con la Biología. La casa de los Biólogos fue la coqueta, la que guiñó el ojo a la casa de los Químicos, cuando se empeñó en que quería conocer la composición química de los seres vivos. La primogénita de ese matrimonio, la Bioquímica, ha procreado muchos hijos, desde los que dedican su vida a conocer la estructura y la función de las macromoléculas, pasando por aquellos que se concentran en los mecanismos subyacentes a los procesos biológicos y a su dinámica, hasta los más recientes herederos, los biotecnólogos, que quieren curar las enfermedades que nos matan, y mejorar y ampliar los recursos agroalimentarios ante el aumento de la población mundial.

Poco después de la luna de miel de las casas de la Química y la Biología, uno de los representantes más excelsos de la primera, Berzelius, nos dio una definición que ahora suena, al menos, extraña: “la parte de la Fisiología que describe la composición de los organismos vivos y los procesos químicos que en ellos acontecen, se denomina Química Orgánica”. Esta visión vitalista, donde la Química Inorgánica era la Química del laboratorio donde se podían sintetizar sustancias y la Química Orgánica era la Química de los seres vivos, perduró por muchos años hasta que Wöhler sintetizó en el laboratorio a la urea, esa sustancia que unos cincuenta años antes otro químico, Rouelle, logró aislar de la orina de humanos, vacas y caballos. Así, las casas de la Biología y de la Química se reconocieron mutuamente

enamoradas. Un matrimonio por amor y también por conveniencia, la primera casa para comprender a los seres vivos y la segunda para aprender cómo los organismos sintetizan y procesan multitud de sustancias de manera muy eficiente.

Inevitablemente, en esas fiestas y reuniones que hacen todas las casas de abolengo, los hijos de la Química y la Física, los fisicoquímicos, y aquellos nacidos de su matrimonio con la Biología, los bioquímicos, terminaron por conocerse e intimar. Una intimidad que permitió, por ejemplo, a Svedberg desarrollar la técnica de la ultracentrifugación analítica para demostrar que las proteínas son macromoléculas, y a Watson y Crick deducir la estructura de doble hélice del DNA a partir de los estudios de cristalografía de rayos X de Franklin y Wilkins y los de apareamiento de bases nitrogenadas de Chargaff. Una intimidad que en nuestros días ya incluye más claramente que nunca a las tres casas, la Química, la Física y la Biología —¡que escándalo, un menage a trois!—, cuyo hijo más destacado es la Biología Molecular, que estudia la estructura, función y composición de las moléculas biológicamente importantes. Sus abuelos, la Química, la Física y la Biología, y sus padres, la Fisicoquímica y la Bioquímica, le han dado las herramientas para sus objetivos: los análisis químicos, cualitativo y cuantitativo, los conocimientos de la Química orgánica, la Biología de microorganismos y de virus, etcétera. Y de especial importancia los nuevos métodos microanalíticos tanto físicos como químicos, que fueron desarrollados a partir de lo que la Física nos ha enseñado de cómo se comporta la naturaleza: la microscopía electrónica, la difracción de rayos X, la cromatografía de gases y líquidos, la espectroscopía en el infrarrojo y de masas, la resonancia magnética nuclear, etcétera.

No cabe duda de que los matrimonios entre las casas de la ciencia han convertido a las viejas y oxidadas fronteras entre ellas, en unas membranas permeables y difusas donde ya nadie puede decir bien a bien a cuál casa pertenece. Así, los cien años que han transcurrido desde el Premio Nobel de Química para Marie Curie, que celebramos con este Año Internacional de la Química, presentan casas mixtas, productivas, en explosión demográfica. En una situación radicalmente distinta, excepto por la cola de cochino, a la del último Buendía de Cien Años de Soledad...

1 Una muestra de la actualidad de esa discusión es la existencia simultánea —y la importancia equivalente— de las revistas científicas *Journal of Chemical Physics* y *Journal of Physical Chemistry*. El colmo viene de la existencia de una revista conciliadora al respecto: ¡*Physical Chemistry Chemical Physics*!

2 Breaking the billion-hertz barrier. A. Bhattacharya. News Feature. *Nature* 463, 605 (2010). doi:10.1038/463605a

3 Breve resumen histórico de la resonancia magnética nuclear. Francisco Sánchez Ferrando.
www.uam.es/otros/germn/images/01Historia_RMN.pdf (consultado 20.08.11)

4 <http://vr-zone.com/articles/intel-launches-10-cores-xeon-e7-series-westmere-ex-/11806.html>
(consultado 20.08.11)