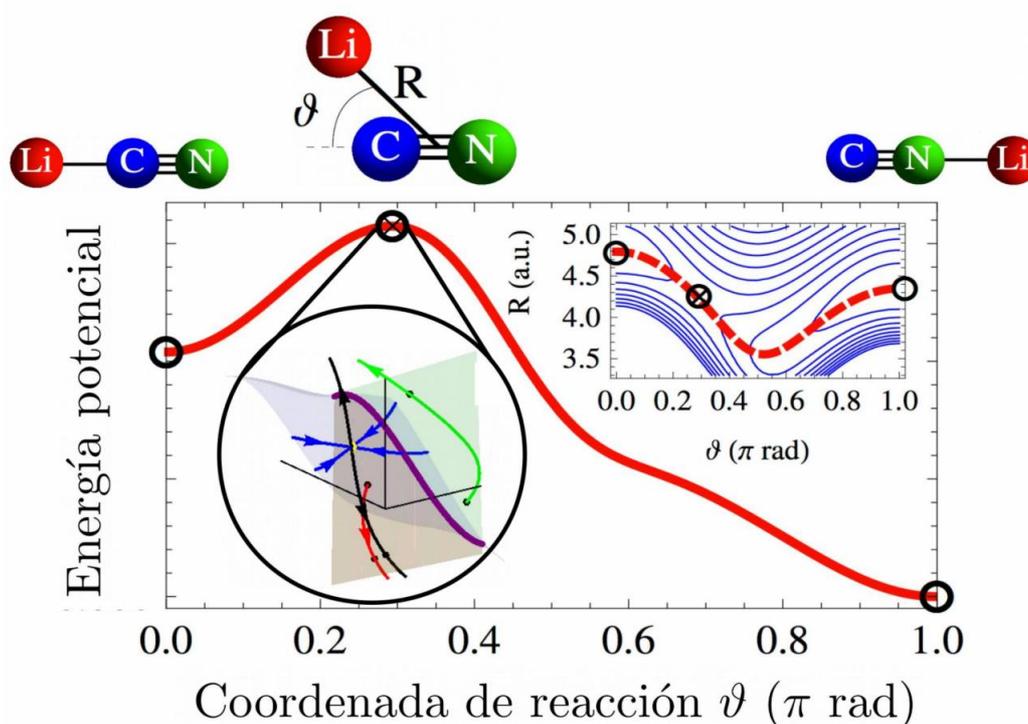


'Toboganes' para explicar reacciones químicas

Investigadores de la Universidad Politécnica de Madrid han presentado un método teórico que permite predecir, sin necesidad de ninguna simulación numérica, si un sistema químico reaccionará o no. La metodología se basa en la identificación de estructuras geométricas, como las que aparecen en una reacción del cianuro de litio, que actúan como 'toboganes' en la dinámica del sistema.

SINC

21/3/2017 09:09 CEST



Energía potencial (línea roja continua) de la molécula cianuro de litio a lo largo de la coordenada de reacción (línea roja discontinua en el panel pequeño), desde el producto (Li-CN mostrado arriba a la izquierda) hasta el sistema del isómero reactivo (CN-Li, arriba a la derecha). La reacción está condicionada por las estructuras mostradas en el círculo que aparecen en torno al estado de transición (arriba en el centro) situado en lo alto de la barrera (círculo con aspa). / Fabio Revuelta, Grupo de Sistemas Complejos.

Una investigación realizada por el [Grupo de Sistemas Complejos](#) de la Universidad Politécnica de Madrid (UPM) ha conseguido desarrollar una

metodología empleando procedimientos de mecánica celeste que permiten describir la dinámica de un sistema químico como si sus partículas se movieran por 'toboganes'. En la actualidad, los investigadores están utilizando dicha metodología para desarrollar nuevos modelos que hagan realidad uno de los mayores sueños de los químicos: controlar de forma inequívoca cualquier tipo de reacción.

Desde sus orígenes, la química (o la alquimia antiguamente) ha tratado de predecir si ciertos elementos podían combinarse y, de ser así, con qué velocidad. Aunque este problema es muy antiguo aún no existe una teoría que dé una respuesta completamente satisfactoria al respecto. El problema fundamental reside en que la mayor parte de las reacciones no se lleva a cabo de forma aislada, sino en presencia de un 'baño' o entorno con el que los reactivos interaccionan fuertemente.

Una vez conocidas la estructura geométrica o 'tobogán' se puede predecir si una trayectoria va a reaccionar o no sin necesidad de ninguna simulación numérica

El ingente número de partículas que conforman este baño (del orden del número de Avogadro, que es casi un billón de billones de átomos), hace que sea completamente imposible realizar simulaciones numéricas de todas ellas, por lo que resulta imprescindible utilizar ciertas aproximaciones para poder abordar el problema.

Una de las aproximaciones más fructíferas es la teoría del estado de transición. Esta teoría es capaz de predecir la velocidad de una reacción con gran precisión analizando lo que pasa solo en el llamado estado de transición o complejo activado, un estado intermedio que actúa como cuello de botella para la reactividad, en el que no tenemos ni los reactivos originales ni los productos finales de la reacción sino una situación intermedia.

Sucede algo similar a lo que pasa cuando un niño pequeño se tira por un tobogán: el padre o la madre del niño lo suben rápido a lo alto del mismo y

baja también rápido por él. Sin embargo, lo que más tiempo lleva, una vez subido en lo alto del tobogán, es encontrar la posición adecuada para poder deslizarse sin problemas, decirle que tenga cuidado, que se agarre bien, abrocharle la ropa, etc.

A lo largo de los últimos años, se ha venido desarrollando una nueva y exitosa teoría del estado de transición dependiente del tiempo que emplea avanzados métodos matemáticos y herramientas de la mecánica celeste para el cálculo de la velocidad de una reacción. No obstante, esta teoría únicamente se había aplicado a sistemas muy simples.

Avances en la teoría del estado de transición

Ahora los investigadores del Grupo de Sistemas Complejos de la UPM, liderados por Rosa Benito, han avanzado en el estudio y desarrollo de esta teoría. Tal y como señalan, “hemos extendido con éxito la teoría del estado de transición a situaciones más realistas y la hemos aplicado al estudio de diferentes sistemas modelo con una o varias dimensiones, así como a un sistema molecular: la reacción de isomerización de la molécula de cianuro de litio”.

La metodología que han desarrollado se basa en la identificación de las estructuras geométricas (variedades invariantes) que actúan como 'toboganes' y que son los objetos que determinan la dinámica del sistema. Una vez conocidas estas estructuras, es posible predecir si una trayectoria va a reaccionar o no sin necesidad de ninguna simulación numérica. Además, añaden los investigadores, “las estructuras anteriores nos han permitido extender otras teorías previas a situaciones más realistas”.

La metodología, cuyos detalles se han publicado en revistas como *Physical Review E*, se aplica en la actualidad a sistemas sometidos a la acción de fuerzas mecánicas (dentro de la llamada mecanoquímica) y haces láser (como se hace en [femtoquímica](#)) para desarrollar nuevos modelos.

Referencia bibliográfica:

F. Revuelta, T. Bartsch, P. L. Garcia-Muller, R. Hernandez, R. M. Benito,

y F. Borondo. "Transition state theory for solvated reactions beyond recrossing-free dividing surfaces", Phys. Rev. E 93, 062304 (2016)
<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.93.062304> .

T. Bartsch, F. Revuelta, R. M. Benito, y F. Borondo. "Rate calculation with correlated noise". (enviado). Disponible en
<https://arxiv.org/abs/1608.05397>.

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

REACCIÓN | MOLÉCULAS | MODELOS |

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)