

¿Qué sabemos del agua?



El agua, ese “mar de vidrio semejante al cristal”, forma una parte significativa de nuestro planeta, de nuestro cuerpo, y figura normal y cotidianamente en la vida de todos. Aquí es descrita como una sustancia, observada y estudiada desde siempre.

Luis Emilio Rendón Díaz Mirón y María Eugenia Lara Magaña

El agua ha recibido más atención científica que ninguna otra sustancia. Es la molécula más común en la superficie de la Tierra; cubre aproximadamente tres cuartas partes de su superficie; su vapor impregna toda la atmósfera; es un “disolvente casi universal”, y contemplamos esto a tal extremo que tenemos la tendencia a considerar los disolventes no acuosos como “poco usuales”. El agua constituye 70 por ciento del cuerpo humano y de la comida que consume. En general, la vida cimentada en el átomo de carbón, como nosotros la conocemos, se basa y consiste mayoritariamente en agua. El agua es un ejemplo estimulante y paradójico de complejidad y simplicidad en la naturaleza.

A simple vista —y si uno observa únicamente la simple composición química del agua (H_2O)—, la molécula no parece compleja. De

hecho, el agua es un miembro de la familia de moléculas con fórmula general H_2X , donde X es un elemento del grupo 16 de la tabla periódica de los elementos, formada por oxígeno, azufre, selenio, telurio y polonio. Por ejemplo, si X es azufre, tenemos H_2S (ácido sulfhídrico o sulfuro de hidrógeno), compuesto con peso molecular mayor que el del agua; es una sustancia gaseosa de olor picante y característico (es el gas liberado en los drenajes urbanos, que otorga ese característico olor repulsivo a la red de alcantarillado).

Analizando esta extraña situación, vemos que el agua debería ser un gas, como los demás compuestos de dicha familia. La razón por la que se presenta como líquido en condiciones comunes es que entre sus moléculas se forma un sinnúmero de enlaces de hidrógeno (también llamados “puentes de hidrógeno”), tal como fue sugerido por primera vez por Linus Pauling, premio Nobel de Química (1954) y de la Paz (1962).¹ Los enlaces de hidrógeno estabilizan enormemente la estructura líquida del agua, y una consecuencia inmediata es que su punto de fusión, así como su punto de ebullición, son mucho más altos que los mostrados por otras sustancias de su misma familia.

¿QUÉ ES EL ENLACE DE HIDRÓGENO?

La distribución de las cargas eléctricas en la molécula de agua es en realidad esférica, particularmente del lado negativo (figura 1). Como resultado, existe un exceso de carga negativa en un lado de la molécula y un exceso de carga positiva en el otro.

Esto ocasiona la formación de un momento dipolar muy grande (distribución asimétrica de las cargas, que ocasiona que la molécula tenga un polo positivo y otro negativo), y es la base fundamental para la formación del enlace de hidrógeno (figura 2).

Esta situación —las moléculas de agua se encuentran polarizadas y los átomos de hidrógeno positivos son atraídos por la nube electrónica negativa alrededor del átomo de oxígeno de la molécula vecina, formando débiles enlaces de hidrógeno— significa, en teoría, que existe una atracción electrostática sin necesidad de compartir electrones.

Sin embargo, esta imagen clásica limpia de la ligadura de hidrógeno no concuerda con la descripción de la mecano-cuántica del enlace covalente entre oxígeno e hidrógeno.

Pauling había predicho que los electrones que forman el enlace normal covalente entre los átomos de oxígeno e hidrógeno del agua deberían distribuirse hasta los enlaces de hidrógeno entre dos moléculas de agua.

Investigadores de los laboratorios Bell, en los Estados Unidos de América; del Instituto Steacle para Ciencias Moleculares de Canadá, en Ottawa, y de las instalaciones de Radiación de Sincrotrón Europeo (ESRF), en Grenoble, Francia, acordaron aclarar esto de una vez por todas.²

La estrategia consistió en utilizar la llamada dispersión de Compton: bombardear los enlaces con fotones y analizar cuánta energía es absorbida por los electrones que los forman. De esta manera se sabe si existen electrones en ese enlace. Lograr un impacto en los electrones del enlace no es tarea fácil, pero con el poderoso haz de rayos X del ESRF,³ instrumento de tercera generación —el primer uso de rayos X fue obtener radiografías; después, la determinación de estructuras, tal como la del ADN—, se puede enfocar un fuerte haz de radiación en un área muy pequeña. Se esperaba tener éxito y lograr un número detectable de impactos.

En el experimento se dirigió un haz de fotones de rayos X —tan delgado como una aguja— a un cristal de hielo especialmente preparado, y con una energía tan calculada y precisa que estuviera dentro del rango de energía de los electrones del enlace supuestamente covalente. El electrón absorbe la radiación

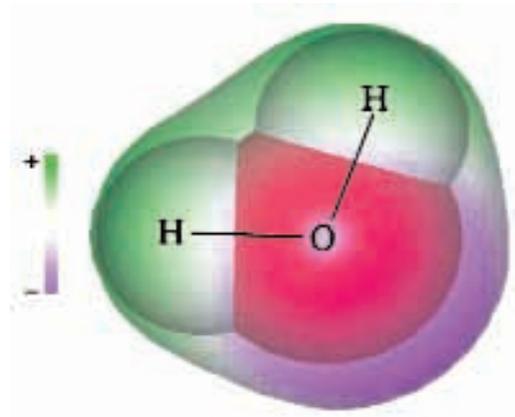


Figura 1.

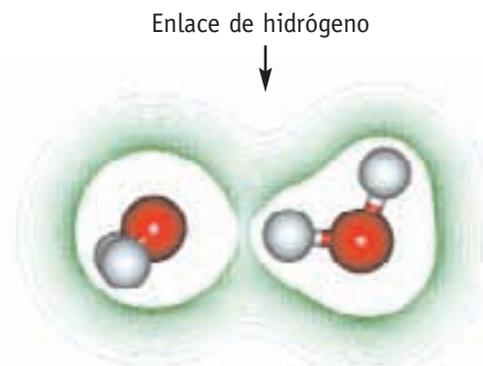


Figura 2.

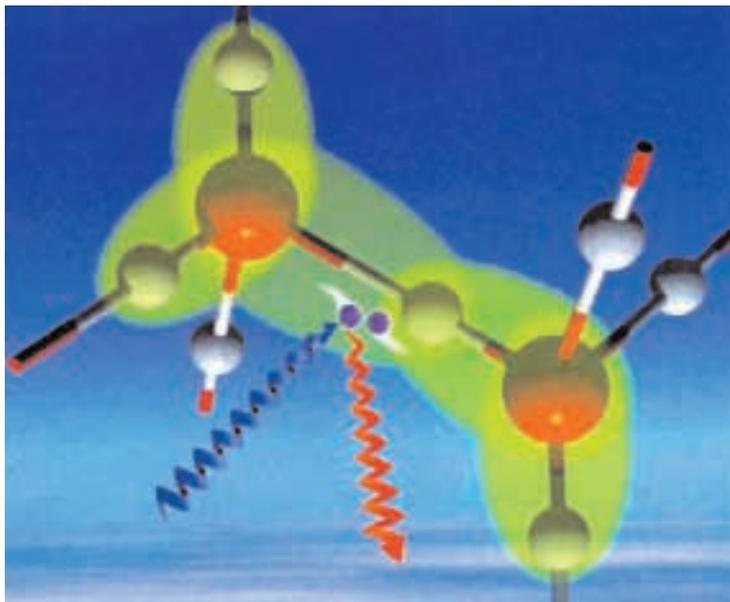


Figura 3.

Cada molécula de agua es como una pequeña partícula de imán que tiene la tendencia a aglomerarse

y la reemite, de la misma manera que un diapasón absorbe y reemite las vibraciones sonoras. Un detector colocado cerca del haz detectaba los fotones rebotados y medía su energía.

La distribución de energía registrada indicaría cuánta de ella perdían los fotones al interactuar con los electrones de la muestra. En el experimento se contaron fotones durante 23 horas; luego se reorientó el cristal de hielo y se repitió la operación.

La primera orientación se escogió de tal manera que el enlace de hidrógeno fijo en el cristal fuera paralelo al rayo que penetraba; la segunda puso el enlace de hidrógeno en una dirección perpendicular al rayo (figura 3). Si el enlace de hidrógeno fuera puramente electrostático, no habría diferencia en los perfiles de energía; sin embargo, si el enlace de hidrógeno fuera parcialmente covalente, habría electrones compartidos dentro de la ligadura, los cuales se comportarían como ondas mecánicas; y cuando las distribuciones de energía registradas se sustrajeran una de la otra se obtendría un patrón de interferencia. Cuando se realizó dicha operación, se obtuvieron ondas de acuerdo con las predicciones

sobre cómo los electrones de los enlaces covalentes entre oxígeno e hidrógeno “penetrarían” en los enlaces de hidrógeno entre dos moléculas.

El enlace de hidrógeno en el hielo es, entonces, más que sólo una unión electrostática debida a la atracción de polos de carga opuesta; en realidad se trata de una unión química formal con carácter covalente.

¿Cómo es la situación en el agua líquida? ¿Existe también ese carácter covalente en el enlace de hidrógeno? Definitivamente sí. En el agua, como líquido, existe un orden de corto alcance.

¿QUÉ ES EL ESTADO LÍQUIDO?

Cada molécula de agua es como una pequeña partícula de imán que tiene la tendencia a aglomerarse, limitando y orientado el movimiento molecular.

El agua se mantiene en estado líquido debido a la continua formación y ruptura de los enlaces de hidrógeno. En general, la vida promedio de cada enlace de hidrógeno varía entre una milmillonésima de segundo (un picosegundo) y una billonési-

ma de segundo (un femtosegundo). Así, la duración del enlace de hidrógeno es muy breve; de otra manera, el comportamiento del agua sería el de un gel. Podemos visualizarlo como una gelatina que se deshace y se vuelve gel cada mil millonésima de segundo, de tal modo que el resultado es un líquido y no un gel.

Se sabe poco sobre el estado líquido de la materia. Podemos explicar las propiedades del agua sólida (hielo) y las del vapor, pero el estado líquido es todavía un misterio. Al respecto, los físicos forman dos bandos: unos consideran el estado líquido como un fluido altamente comprimido y otros como un sólido relajado. Existen líquidos simples o atómicos, como el argón líquido (Ar); líquidos dobles o diatómicos como el nitrógeno líquido (N_2) y, por supuesto, el agua, considerada un líquido molecular (H_2O).

Para entender la estructura molecular del agua líquida, primero debemos familiarizarnos con la estructura del agua sólida (hielo). Hasta ahora existen catorce tipos conocidos de formas (estados cristalinos) para el hielo, dependiendo de las condiciones de presión y temperatura. La forma común y natural es hexagonal (figura 4).

La gran fortaleza (debido al novedoso carácter covalente) de los enlaces de hidrógeno, que obliga a la formación de cavidades a través de toda la estructura del hielo, hace que éste tenga una densidad menor que la del agua líquida.

Si el enlace de hidrógeno fuera menos fuerte y no forzara este tipo de estructura abierta, el hielo sería más denso que el agua. Si ése fuera el caso, el hielo se hubiera hundido al mismo tiempo que se formaba en los océanos a lo largo de la historia de la Tierra y, una vez en el fondo, aislado del tibio medio ambiente, se hubiera acumulado. Al final, el nuestro sería un mundo congelado.

En las formas artificiales de hielo, logradas mediante la aplicación de grandes presiones, se logra obtener estructuras más densas que el agua. En la figura 5 se muestra la estructura del hielo sintético “hielo-II”.

¿CÓMO ES LA ESTRUCTURA MOLECULAR DEL AGUA LÍQUIDA?

Con respecto al agua líquida, el modelo estructural más cercano a la realidad es una especie de compresión parcial de la estructura del hielo común (figura 4), a una estructura similar a la del hielo artificial “hielo-II” (figura 5). En el agua existe una fuerte tendencia a formar cúmulos de cinco átomos de oxígeno y diez de hidrógeno ($H_{10}O_5$). Esto se debe a que la molécula de



Figura 4.

Podemos explicar las propiedades del agua sólida (hielo) y las del vapor, pero el estado líquido es todavía un misterio



Figura 5.



La estructura del agua puede describirse como “un mar de vidrio semejante al cristal”

agua forma enlaces fuertes orientados en forma tetraédrica respecto a sus primeros vecinos, tal como sucede en el hielo. Sin embargo, el agua como líquido tiene libertad de movimiento y permite un acomodo de moléculas más compacto. Por eso los enlaces de hidrógeno de los segundos vecinos se distorsionan y estructuran como en el hielo artificial “hielo-II”.⁴

La estructura del agua puede describirse como “un mar de vidrio semejante al cristal”. Imaginemos una molécula gigante (macromolécula) vítrea en furioso movimiento térmico en la que, a diferencia de las perfectas esferas que muestran los modelos de líquidos ideales, se tienen moléculas de agua agregadas en cúmulos de cinco, unidas por los tan especiales enlaces, con carácter covalente, de hidrógeno (denominados también “enlaces intactos”, debido a que su duración es ligeramente mayor que las de los demás enlaces de hidrógeno). De esta manera, el agua mantiene una estructura de tipo cristalino (ordenado) que dura algunos femtosegundos, aunque el resultado final es vítreo (desordenado).

Si se pudiera tomar una serie de fotografías, cada femtosegundo el agua tendría la apariencia de un cristal, con una estructura similar a la de un hielo con densidad parecida a la del agua a esa temperatura.

El enlace de hidrógeno funciona como un obstáculo para los movimientos distorsionadores; éstos, altamente dependientes de la temperatura, favorecen el desorden y la conformación vítrea pero, en el caso de los primeros vecinos, el cúmulo de cinco moléculas adquiere carácter covalente y permanece más o menos invariable.

Es fuerte la tendencia que tiene el agua a formar una estructura abierta. Por ejemplo, si la enfriamos lentamente se infla hasta formar hielo, pero si calentamos el hielo, se funde, se comprime, y si la temperatura sigue en aumento, también se incrementa la movilidad. Por lo tanto, cada intensificación energética favorecerá la tendencia de la estructura a distorsionarse y colapsarse.

Pero si la temperatura sigue subiendo (hasta alcanzar la ebullición), los enlaces de hidrógeno terminan por romperse y las moléculas de agua, libres ya, y con una gran energía cinética, se alejan unas de otras causando una abrupta baja en la densidad, que es el cambio al siguiente estado: vapor. Todo esto requiere una gran cantidad de energía, lo cual se refleja en la alta capacidad calorífica del agua (es decir, la gran cantidad de energía que se requiere para incrementar su temperatura), fenómeno por el cual, por ejemplo, se utiliza agua en el radiador del automóvil en vez de algún otro líquido, sofisticado y caro.⁵

Otro hecho significativo es que en el cambio de estado de hielo a agua se cumple el principio de Le Chatelier. Este principio, extremadamente sencillo, dice: “Cuando una influencia externa, como una presión o un cambio de temperatura, se aplica a un sistema en equilibrio, el equilibrio se desplaza en la dirección que contrarreste la influencia externa”. En otras palabras, para un sistema que contiene una mezcla interconvertible de moléculas extendidas y comprimidas en equilibrio, la presión causa que el equilibrio se mueva hacia la formación de moléculas comprimidas. Cualquier sólido, si se le aplica presión, se vuelve más denso, pero la experiencia nos muestra que en el hielo no es así. Si aplicamos presión, el hielo se funde, razón por la cual es posible patinar sobre hielo.

El principio de Le Chatelier nos ayuda a entender el cambio de volumen (a un volumen menor) en la fusión del hielo; la densidad aumenta en el líquido, y el hielo que no se ha derretido, flota.

Esta unión-desunión tan especial del enlace que permite la existencia del líquido, esta inmanencia de a veces un picosegundo y en otras ocasiones de un femtosegundo, que une cada unidad molecular de agua, da como consecuencia su propiedad más maravillosa: su capacidad de reciclado y gran estabilidad química o, mejor dicho, fisicoquímica, ya que el agua es capaz de interactuar efectivamente en una gran diversidad de sustancias orgánicas e inorgánicas y, sin embargo, con un simple proceso de separación como destilación, ósmosis inversa, filtración, etcétera, se puede recuperar perfecta, íntegra y limpia.

Referencias

- ¹ Linus Pauling—Scientist for the Ages, The Linus Pauling Institute, <http://osu.orst.edu/dept/lpi/lpbio/lpbio2.html>
- ² E.D. Isaacs *et al.*, “Covalency of the Hydrogen Bond in Ice: Direct X-ray Evidence”, <http://epswww.epfl.ch/aps/meet/CENT99/BAPS/abs/S9555010.html>
- ³ The European Synchrotron Radiation Facility, <http://www.esrf.fr/info/ESRF/index.html>
- ⁴ Jacob Urquidi, “Explicit Outer Bonding Transformations in Liquid Water. The Key to its Understanding”, <http://www.phys.ttu.edu/~dujcb/ECCC5/Outer/>
- ⁵ Martin Chaplin, “Water structure and behavior: Explanation of the anomalies of water”, <http://www.sbu.ac.uk/water/explan.html#Cv>

Luis Emilio Rendón Díaz Mirón obtuvo el doctorado en Ciencia de Materiales e ingeniería en la Universidad de Austin en 1977. En 1987 sintetizó (en México) la fase superconductora $YBa_2Cu_3O_{6-x}$ (fase 123 YBCO) con una temperatura crítica de 90 K. De 1995 a 1999 fue coordinador académico adjunto del doctorado en Ciencia de Materiales de la Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Es autor o coautor de más de treinta artículos científicos o técnicos en revistas internacionales y un capítulo de libro. Ha realizado investigación aplicada o desarrollo de tecnología mediante convenios privados de asesoramiento con varias compañías. Actualmente desempeña funciones de investigación y desarrollo tecnológico en ciencia de materiales, en aspectos referidos a la gerontología de materiales, prevención de la corrosión, tratamiento de agua residual, procesos de potabilización y procesos de desalación, en el Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, para el sector agua de la nación. lerendon@tlaloc.imta.mx

María Eugenia Lara Magaña es química farmacobióloga, graduada con honores en la Universidad de Texas, en Austin, y miembro de la American Pharmaceutical Association. Su más temprana experiencia fue en las áreas de cosmetología y enzimología. Desarrolló nuevos cosméticos en las compañías Warner-Lambert y The Health Center U.T. Austin. Cambió de rubro al incursionar en la firma de asesoría Ciencia e Ingeniería de Materiales al Servicio de la Industria (CIMS), donde su principal actividad fue el asesorar a diferentes industrias sobre sus métodos productivos y el cuidado del medio ambiente. En 1997 regresó al ambiente académico, estudiando el doctorado en Ciencia de Materiales en la Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Su trabajo de investigación se titula “Estudio de la corrosión microbiológicamente inducida en los sistemas de drenaje y alcantarillado urbano”. marulara@buzon.uaem.mx