

# La chimie dans l'espace

Perren, Martha,<sup>1</sup> Odetti, Héctor<sup>1</sup>

## Abstract (*La chimie dans l'espace*)

Although some suggestions had been made about the arrangement of atoms in space before 1874, van't Hoff gave a decisive step in that year, when he published a pamphlet and an expanded version some time later entitled "La chimie dans l'espace", giving significance to the concept of tetrahedral carbon.

By that time it was regarded as a curious idea from the point of view of physical laws, but very useful for explaining and predicting isomers. The new theory was faced objections from other scientists but was defended by Wislicenus and progressively gained adherents.

At present, General Chemistry students have to imagine molecules in three dimensions and relate them with representations in the paper. This is very important for student's understanding of many chemical concepts.

A historical approach could be interesting in the introduction of three-dimensional molecules.

## Introducción

La materia puede observarse y estudiarse macroscópicamente y los fenómenos observados muchas veces se interpretan dando explicaciones a nivel de átomos y moléculas. A su vez, ambos niveles se pueden representar mediante símbolos. Los químicos experimentados son conscientes de esto, pero es arduo de entender para el que se inicia en su estudio.

"Tomemos, por ejemplo, un modelo de bolas y palillos del metano. ¡Cielos!, piensa alguien que no es químico. ¿Qué sucede aquí? ¡El metano no es eso! El metano es un gas incoloro" (Bent, 1984).

Por supuesto, el metano no es así. El modelo es una metáfora, podríamos contestar. Aun así, le queda a nuestro interlocutor un largo camino por recorrer para establecer una conexión entre ambos.

<sup>1</sup> Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas, Universidad Nacional del Litoral. Paraje El Pozo. 3000 Santa Fe. Argentina.  
Correo electrónico: hodetti@fbcb.unl.edu.ar

Recibido: 12 de abril, 2005; aceptado: 5 de septiembre, 2005.

Según el diccionario, una metáfora es una figura retórica mediante la cual se presentan como idénticas dos cosas distintas. Aunque normalmente la asociamos sólo con la literatura, la metáfora impregna todo nuestro pensamiento y sistema conceptual.

Y es lo que imaginamos revisando la historia de la química. Veamos a continuación un ejemplo donde la metáfora buscada requiere un alto componente de imaginación visual-espacial.

## La historia

Podemos remontarnos a comienzos del siglo XIX; el mineralogista francés René Just Haüy había descubierto que los cristales de cuarzo presentaban facetas hemidrícas<sup>1</sup>. Observó en ciertos cristales una cara muy diferente, inclinada a veces hacia la derecha, cuando el cristal estaba orientado en cierta forma y en otros hacia la izquierda.

Jean Baptiste Biot, entre 1815 y 1835, encontró que ciertos compuestos orgánicos naturales tales como la esencia de trementina, soluciones de azúcar y de ácido tartárico tenían la propiedad de rotar el

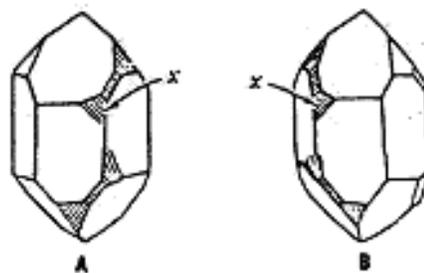


Figura 1. Cristales hemidrícos de cuarzo. Tomada de: Eliel, E. L., Wilen, S. H. y Mander, L. N., *Stereochemistry of organic compounds*, Wiley, USA, 1994.

<sup>1</sup> Estas facetas se presentan en un número igual a la mitad del requerido para que haya simetría completa. Como resultado, estos cristales no son superponibles con su imagen en espejo.

<sup>2</sup> Luz polarizada en un plano es luz cuyas vibraciones ocurren en uno solo de los planos posibles. Una sustancia ópticamente activa desvía el plano de la luz polarizada. Cuando se hace pasar luz polarizada en un plano determinado por una sustancia ópticamente activa, emerge vibrando en un plano diferente.

plano de la luz polarizada<sup>2</sup> en uno u otro sentido. También lo observó en los diferentes cristales de cuarzo. Pero, como relató Louis Pasteur en 1860 al explicar los precedentes de su trabajo, encontrar rotación en líquidos y en soluciones, que el tubo con la solución de azúcar puede inclinarse sin afectar el efecto, junto con otras observaciones, hacían pensar que la analogía con el cuarzo era sólo superficial y que el carácter del fenómeno era diferente: "El cuarzo desvía pero debe estar cristalizado. Disuelto o sólido y no cristalizado carece de la propiedad". (Pasteur, 1860).

Ingeniosamente, sir John Herschel, alrededor de 1820, conectó los descubrimientos de Haüy y Biot, asociando la forma geométrica de los cristales de cuarzo con la dirección de la rotación.

En 1841, M. de la Provostaye publicó un trabajo sobre las formas cristalinas de los ácidos tartárico y paratartárico y sus sales. Pasteur, que estaba tratando de perfeccionarse en cristalografía, repitió las determinaciones, pero notó algo que había escapado a los otros investigadores: encontró que los tartratos eran hemidrícos y que las caras características presentaban la misma orientación.

Una nota del químico alemán Eilhard Mitscherlich, comunicada por Biot a la Academia de Ciencias de París había despertado su interés. En ella se comunicaba que el tartrato y el paratartrato de sodio y amonio tenían la misma composición química e idénticas formas y características de los cristales, pero al disolverlos, el tartrato tenía actividad óptica y el paratartrato no.

Pasteur, basándose en los antecedentes citados, se había formado la idea de que podía haber una relación entre la hemiedría de los tartratos y su capacidad de desviar el plano de la luz polarizada cuando estaban en solución, pero el informe de Mitscherlich contradecía su hipótesis. Pensó que tal vez el cristalógrafo no había observado las caras hemidrícas del tartrato.

Reinvestigó las dos formas cristalinas de Mitscherlich y encontró que el tartrato tenía pequeñas facetas similares a las observadas por Haüy en el cuarzo, como en los otros tartratos que había estudiado previamente, pero que el paratartrato también las presentaba. Sólo que esas caras, que en el tartrato estaban inclinadas en la misma forma, en el paratartrato estaban a veces inclinadas a la derecha y a veces a la izquierda.

Separó cuidadosamente los dos tipos de cristales, los disolvió y examinó las dos disoluciones en el

aparato de polarización. Encontró que los cristales con la faceta característica a la derecha desviaban el plano de polarización a la derecha y que los que la poseían a la izquierda desviaban hacia la izquierda. Tomó iguales pesos de ambos cristales, disolvió esta mezcla y la encontró indiferente a la luz polarizada, como consecuencia de la neutralización de dos desviaciones iguales y opuestas.

Se puso en comunicación con Biot, quien le hizo

repetir el trabajo en su presencia. Pasteur comentó la emoción del ya anciano científico que durante más de treinta años había tratado en vano de compartir su convicción de que el estudio de la polarización rotatoria ofrecía uno de los medios más seguros para ganar conocimiento de la constitución molecular de las sustancias (Pasteur, 1860).

Se dice que Pasteur fue doblemente afortunado, ya que hay pocas soluciones de racematos que den cristales grandes, diferentes de cada enantiómero y porque la temperatura ambiente era la adecuada para la cristalización. Si hubiera hecho sus experimentos unos pocos meses más tarde (en verano) probablemente no hubiera descubierto los dos tipos de cristales. Diríamos más bien que la suerte le presentó un ejemplo importante y él supo seguirlo.

Pasteur, a partir de las sales, también preparó, purificó y estudió los correspondientes ácidos tartáricos. Encontró que ambos tenían las mismas propiedades pero diferían sólo en que desviaban el plano de la luz polarizada en sentidos opuestos (pero con igual número de grados) y en la inclinación (derecha o izquierda) de las caras hemidrícas.

En estos ejemplos halló una conexión entre el nivel macroscópico (la forma de los cristales) y el nivel de los átomos y moléculas a través del poder de rotación óptica de las sustancias en solución. Sus brillantes intuiciones eran muy atrevidas.



**Figura 2.** El joven Pasteur, mostrándole su trabajo a Biot. Puede verse en: <http://classes.yale.edu/02-03/chem220a/probsets/PS02/PS5-F02/biot.GIF>

Si bien todas las observaciones le hacían pensar, igual que a Biot, en la asimetría de las moléculas involucradas, no estaba desarrollada por ese entonces la idea de estructura molecular como la conocemos en nuestros días.

En 1860, Pasteur resumió y comentó estos trabajos que datan de 1848. Explicó cómo interpretaba la diferencia entre la actividad óptica de los cristales de cuarzo y la de las sustancias orgánicas naturales en solución de esta manera:

“Permitidme ilustrar de un modo sencillo, aunque esencialmente exacto, la estructura del cuarzo y de los productos orgánicos naturales. Imaginad una escalera caracol cuyos escalones sean cubos, o cualquier otro objeto con imagen superponible. Destruyamos la escalera y la asimetría se habrá desvanecido. La asimetría de la escalera era simplemente el resultado de la especial disposición de los peldaños. Así es el cuarzo. El cristal de cuarzo es la escalera completa. Es hemidédrico. En virtud de esto actúa sobre la luz polarizada. Pero permitamos que el cristal se disuelva, funda o pierda su estructura física de cualquier manera; su asimetría desaparece y con ella toda acción sobre la luz polarizada...”

Imaginemos, por otra parte, la misma escalera caracol construida de modo que los peldaños sean tetraedros irregulares. Destruyamos la escalera y la asimetría todavía existirá, ya que es intrínseca a la colección de tetraedros. Podrán ocupar cualquier posición, pero, aún así, cada uno de ellos poseerá una asimetría propia. Así son las sustancias orgánicas en las cuales todas las moléculas tienen una asimetría propia, revelada por la forma del cristal. Cuando el cristal es destruido por disolución, resulta un líquido activo respecto de la luz polarizada, ya que está formado por moléculas, ciertamente sin orden, pero poseyendo cada una de ellas una asimetría en el mismo sentido” (Pasteur, 1860).

Por otra parte, Johannes Wislicenus, estudiando las formas del ácido láctico, atribuyó a estas moléculas, en 1873, un ordenamiento espacial diferente de los átomos. Pero no hubo avances significativos en cuanto a esa disposición.

También otras clases de compuestos con las mismas fórmulas, pero diferentes propiedades, quedaban sin explicar.

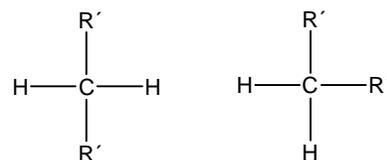
### El carbono tetraédrico

Si bien había ya sugerencias sobre la cuadrivalencia tetraédrica del carbono (Wollaston la había entrevisto en 1808), ésta no estaba en uso. Una descripción de la construcción de un modelo de carbono tetraédrico del tipo bolas y palillos figura en un artículo de 1867 de Friedrich August Kekulé (Kekulé, 1867). Un paso decisivo se produjo en 1874, cuando Jacobus Henricus van't Hoff publicó un folleto en Holanda, que al año siguiente fue ampliado y traducido al francés con el título: **La Chimie dans l'espace**. Casi al mismo tiempo e independientemente Joseph Achille Le Bel en Francia publicó sobre el mismo tema.

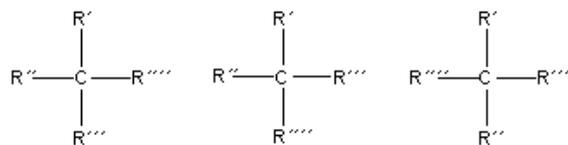
Como las fórmulas constitucionales entonces en uso no podían distinguir algunos isómeros, van't Hoff (1874) reconoció la necesidad de establecer mejor la posición de los átomos.

Hizo suposiciones como ésta: si los átomos están todos en el plano, donde las cuatro afinidades están representadas por cuatro líneas en ese plano ocupando dos direcciones perpendiculares, el metano daría las siguientes modificaciones isoméricas:

- una para  $\text{CH}_3\text{R}'$  y para  $\text{CHR}'_3$
- dos<sup>3</sup> para  $\text{CH}_2\text{R}'_2$ , para  $\text{CH}_2\text{R}'\text{R}''$  y para  $\text{CHR}'_2\text{R}''$ :<sup>3</sup>



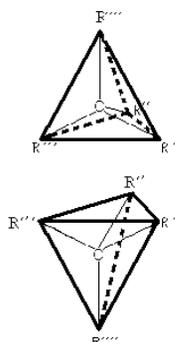
- tres para  $\text{CHR}'\text{R}''\text{R}'''$  y para  $\text{CR}'\text{R}''\text{R}'''\text{R}''''$



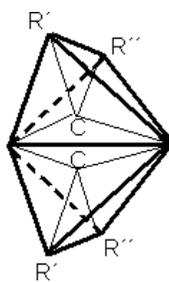
números mayores que los conocidos.

Según van't Hoff, la teoría concordaba con los hechos si se consideraban las afinidades del átomo de carbono dirigidas hacia los vértices de un tetrae-

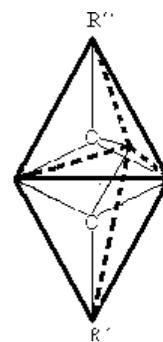
<sup>3</sup> Podría argumentarse que el hecho de que no se encuentre un isómero no indica su inexistencia, sino también nuestra incapacidad para encontrarlo o sintetizarlo.



**Figura 3.** Imágenes en espejo, no superponibles, correspondientes al carbono unido a cuatro grupos diferentes.



**Figura 4.** El doble enlace es representado por dos tetraedros con una arista en común.



**Figura 5.** El triple enlace es representado por dos tetraedros con una cara en común.

dro en el cual el átomo de carbono ocupaba el centro. El número de isómeros se reducía entonces: – uno para  $\text{CH}_3\text{R}'$ ,  $\text{CH}_2\text{R}_2$ ,  $\text{CH}_2\text{R}'\text{R}''$ ,  $\text{CHR}'_3$  y para  $\text{CHR}'_2\text{R}''$  pero – dos para  $\text{CHR}'\text{R}''\text{R}'''$  o más general para  $\text{CR}'\text{R}''\text{R}'''\text{R}''''$  (figura 3).

“Cuando las cuatro afinidades del átomo de carbono son satisfechas por cuatro grupos univalentes diferentes,<sup>4</sup> se obtienen dos y no más de dos tetraedros, uno de los cuales es la imagen reflejada del otro, no pueden superponerse;<sup>5</sup> esto es, se trata de dos fórmulas estructurales isoméricas en el espacio” (van't Hoff, 1874).

Entre los ejemplos citados se encuentran las formas de ácido láctico, cuya explicación había demandado Wislicenus.

En la misma publicación estableció relaciones entre el carbono asimétrico y la actividad óptica y consideró la influencia de la nueva hipótesis so-

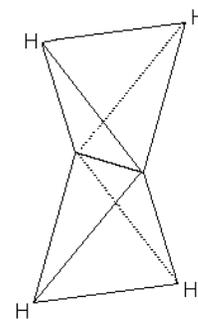
bre compuestos que contienen átomos de carbono unidos por dobles y triples enlaces.

Van't Hoff representó el doble enlace con dos tetraedros con una arista en común (figura 4) y el triple enlace con dos tetraedros con una cara en común (figura 5) y mostró también en algunos trabajos la construcción de figuras de cartón para plegar y construir tetraedros, donde las letras indicaban las iniciales de los colores en el idioma original (figuras 6 y 7).

Van't Hoff tuvo el apoyo del prestigioso químico orgánico Wislicenus, que se ocupó de ampliar y convencer a los oponentes con evidencias experimentales.

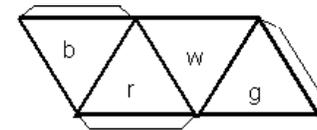
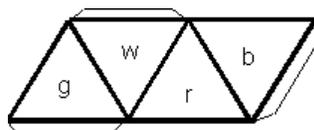
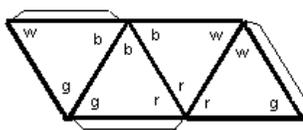
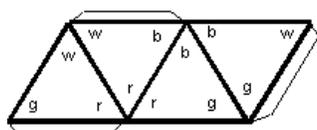
También se utilizaron directamente tetraedros en los dibujos, sin el átomo de carbono central ni líneas de valencia:

Pero Víctor Meyer reconoció luego lo complicado de estos dibujos de tetraedros, con seis aristas sin importancia y decidió enfatizar las líneas de valencia (Ramberg, 2000); Fisher introdujo su convención de fórmulas de proyección y con el tiempo se fueron agregando nuevas maneras de representar las formas tridimensionales de las moléculas en el plano del papel.



<sup>4</sup> Tales átomos de carbono se llaman a continuación carbonos asimétricos.

<sup>5</sup> Más tarde lord Kelvin usó el término “quiral” para designar un objeto que no podía superponerse con su imagen en espejo.



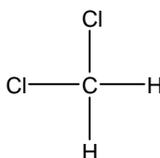
**Figura 6.** Plantillas para construir tetraedros que son imágenes en espejo, no superponibles. El carbono ocuparía el centro del tetraedro y los grupos unidos a él estarían en los vértices, representados por distintos colores.

**Figura 7.** A diferencia de la plantilla anterior, los grupos unidos al carbono se representan en las caras del tetraedro, a través de distintos colores.



**Operación:** Los efectos de rotación, reflexión e inversión sobre representaciones bidimensionales de objetos tridimensionales.

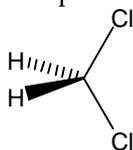
Muchos problemas de química general involucran manipulaciones mentales semejantes a las que vimos en la introducción histórica y a las que se encuentran en tests de habilidades espaciales. Algunos de éstos se refieren a la capacidad de reconstruir formas tridimensionales a partir de imágenes en dos dimensiones, o rotar objetos mentalmente. Encontramos la similitud en química, cuando se trata de conocer, por ejemplo, si



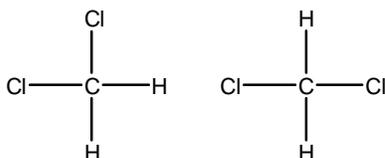
es una molécula polar.

Para resolverlo, el alumno deberá determinar primero la geometría, usando el modelo de repulsión de los pares electrónicos de la capa de valencia (Chang, 1999). Si poseyera un modelo físico concreto, lo movería y acomodaría para poder interpretar, en este caso con base en la polaridad de los enlaces y la geometría, la polaridad de la molécula.

En ausencia de este modelo, lo debería crear y manipular mentalmente. Cuando intente explicárselo a otro (en ausencia del modelo 3D), tal vez recurra a representaciones como la que se muestra a la derecha, para lo cual deberán compartir ciertas convenciones gráficas.



Ante las fórmulas:



el alumno debería reconocer que se trata de la misma molécula; como en nuestro curso no se incluye temas más avanzados de estereoquímica, debe traducirlas a imágenes en tres dimensiones y manipularlas como objetos cualquiera, orientándolas adecuadamente, para verificar su coincidencia.

Y todo esto sin llegar a considerar casos con la posibilidad de rotación de enlaces.

Por introspección podemos llegar a formarnos

una idea de esas “representaciones internas” que hacemos, no solamente en química. Nos estamos moviendo también entonces, sobre un tema que siempre fue de gran interés para la psicología.

Los conductistas relegaron el estudio de los procesos mentales, pero el interés se reavivó con el advenimiento de la psicología cognitiva. Este cambio tuvo su repercusión sobre las teorías de aprendizaje.

Nuestros alumnos, ¿traducen realmente a imágenes en tres dimensiones lo que representan en el papel y viceversa? ¿Son capaces de manipular mentalmente esas formas? ¿O los estamos “entrenando” solamente para dar las respuestas correctas a una serie de preguntas que sólo exigen seguir una secuencia de reglas y memorizar dibujos?

Hemos presentado un resumen, para el docente, de los principales hechos e ideas que llevaron, a través del siglo XIX, a la necesidad de pensar en el ordenamiento espacial de los átomos. Una introducción histórica al tema de geometría molecular, pero convenientemente adaptada al nivel de un curso de Química General, podría llevar también al alumno a la necesidad de pensar las moléculas en términos espaciales. Además de despertar el interés, podría sugerir preguntas y problemas, alentar la construcción y manipulación de los modelos a través de aquellos históricos convenientemente elegidos, facilitar la relación con los dibujos y las fórmulas y redundar en una mejor comprensión.

### Bibliografía

- Bent, H., Uses (and Abuses) of Models in Teaching Chemistry, *J. Chem. Educ.*, **61** (9), 774-777, 1984.
- Chang, R., *Química*, McGraw Hill, México, 1999.
- Fensham, P. J., Implications, large and small, from chemical education research for the teaching of chemistry, *Quim. Nova*, **25** (2), 335-339, 2002.
- Kekulé, A., *Z. Chem.*, **3**, 217, 1867.
- Pasteur, L., *Researches on the Molecular Asymmetry of Natural Organic Products*, Alembic Club Reprints, N° 14. Traducida de *Leçons de chimie professées en 1860*; Société Chimique de Paris, Paris, 1861.
- Ramberg, P., Pragmatism, Belief, and Reduction, *HYLE*, **6** (1), 35-61, 2000.
- van't Hoff, J. H., A suggestion looking to the extension into space of the structural formulas at present used in chemistry and a note upon the relation between the optical activity and the chemical constitution of organic compounds. Traducida de *Archives néerlandaises des sciences exactes et naturelles*, **9**, 445-454, 1874.