

EL EFECTO TÚNEL: SU APLICACIÓN Y ENSEÑANZA EN QUÍMICA

Arias Ávila Nelson.

Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá - Colombia.

nelsona@udistrital.edu.co

Resumen

El efecto túnel en sus diferentes manifestaciones ha sido bien estudiado en varios campos de la Física tales como la desintegración alfa, las reacciones termonucleares, el estado sólido, los semiconductores y superconductores entre otros, sobre lo cual existen múltiples artículos y publicaciones en general. Sin embargo son pocas las publicaciones que, en español, se encuentran sobre dicho efecto en Química.

En este trabajo se muestran algunas de las aplicaciones y manifestaciones del mencionado efecto en Química, las cuales pueden servir de base para su enseñanza y comprensión.

Abstract

The Tunnel effect in its different manifestations has been well studied in several fields of Physics such as the Alpha disintegration, Thermonuclear reactions, Solid state, Semiconductors and Superconductors among others. There are several articles and publications on this topic, however there are very few publications in Spanish about this effect in the field of Chemistry.

This paper seeks to show some of the applications and manifestations of the tunnel effect in Chemistry which will be helpful in the teaching and understanding of this effect.

Introducción

El concepto “efecto túnel” nace en física en 1928 y su explicación se considera uno de los primeros logros de la entonces naciente mecánica cuántica. Para la mecánica clásica si una partícula se encuentra en un pozo de potencial y su energía es menor que las magnitudes máximas de las barreras de potencial, ella no podrá salir del pozo y permanecerá en él realizando movimientos oscilatorios entre las paredes del mismo, hasta que su energía por algún efecto externo sea superior a la altura de la mencionadas barreras.

Clásicamente el movimiento de las partículas se describe considerando sus coordenadas y velocidad en cada punto de la trayectoria; así para determinar el movimiento de cualquier sistema, por complejo que sea, es suficiente conocer las

coordenadas y velocidades de todas las partículas que lo componen en un determinado momento, posteriormente empleando la segunda ley de Newton se podrá encontrar las coordenadas y velocidades en cualquier momento de tiempo deseado. Aunque para algunos sistemas este cálculo puede ser muy difícil, en principio siempre es posible. Para la mecánica cuántica, que rige el movimiento del micromundo, la situación es diferente; acá el movimiento de las partículas es descrito por la función de onda $\Psi(r, t)$, la cual es función de las coordenadas espaciales y del tiempo. Si se conoce la función de onda en un momento inicial, es posible conocer dicha función en cualquier momento de tiempo por medio de la ecuación de Schrödinger, ecuación básica de la mecánica cuántica. La función de onda es una función compleja, el cuadrado de su módulo $|\Psi(r, t)|^2$ determina la probabilidad de que la partícula se encuentre en el punto r en el instante t ; la energía total del sistema se conserva.

De la ecuación de Schrödinger se puede deducir el conocido principio de incertidumbre de Heisenberg, el cual establece que algunas características macroscópicas de un sistema o partícula no pueden definirse simultáneamente con precisión, por ejemplo su cantidad de movimiento y su posición. Si las "imprecisiones" en las magnitudes mencionadas se designan como Δp y Δx respectivamente se puede afirmar que $\Delta p \Delta x \sim h$, donde h es la constante de Planck. Esta relación de incertidumbre permite predecir cualitativamente muchos fenómenos del micromundo, sin necesidad de un riguroso análisis matemático.

Como se dijo anteriormente, de acuerdo a la mecánica clásica, la partícula no puede atravesar la barrera de potencial pues ello significaría que su energía cinética sería negativa. Sin embargo de acuerdo al principio de incertidumbre las energías cinética y potencial no pueden ser determinadas simultáneamente con precisión, la energía cinética depende del impulso y la potencial de las coordenadas. Por eso si una partícula se encuentra en un pozo bajo una barrera de potencial, su energía cinética no podrá ser determinada con certeza y no podrá decirse que ella es negativa, esto indica que la probabilidad de encontrar la partícula en el interior de la barrera puede ser diferente de cero, es decir, la partícula puede "infiltrarse" en la barrera y atravesarla como por un túnel, de ahí el nombre dado a este efecto, el cual es posible fundamentalmente para partículas ligeras y a muy pequeñas distancias.

Son múltiples los estudios y publicaciones que existen sobre diferentes aplicaciones del mencionado efecto en campos tales como la desintegración alfa, las reacciones termonucleares, el movimiento de electrones en estado sólido, la emisión fría o autoemisión, la espectroscopia túnel, la luminiscencia túnel, los

semiconductores y superconductores entre otros, se analizarán ahora algunas de las manifestaciones del efecto túnel en Química.

El efecto túnel en Química

Gran parte de los fenómenos enunciados contemplan la tunelización de electrones en diferentes medios, lo cual hizo pensar durante mucho tiempo que como en la mayoría de las reacciones químicas las partículas pasadas (átomos o iones) debían desplazarse de una molécula a otra una distancia del orden de 10^{-8} cm, mucho mayor que en las reacciones nucleares (10^{-12} cm), la tunelización de estas partículas pesadas a través de las barreras de potencial no debía tener mayor peso en las reacciones químicas, sin embargo al estudiar los fenómenos químicos a bajas temperaturas, la situación cambió.

En las reacciones químicas la velocidad de los núcleos pesados que entran en la composición de las moléculas es mucho menor que la velocidad de los electrones, lo cual permite hablar de la energía de los electrones (electrónica) del sistema como dependiente de las coordenadas de sus núcleos. Dicha energía electrónica dependerá del estado cuántico en que se encontraban los electrones en los átomos y moléculas antes de que estuvieran a la distancia necesaria para que comience la reorganización de los átomos en las nuevas moléculas, es decir, antes de que se inicie la reacción química propiamente dicha. Esta energía electrónica U_e , conocida también como término electrónico del sistema, junto con la energía de interacción entre los núcleos, constituye el llamado término total del sistema U , cuya energía puede considerarse como la energía potencial del sistema de núcleos en el cual se mueven e interactúan los electrones, de tal forma que se conserve la energía total del mismo.

El término del sistema, sobre todo si este está compuesto por muchos átomos, es una función compleja de muchas coordenadas, la cual es difícil de calcular aun hoy con los avanzados sistemas de computación; son pocos los sistemas reales para los cuales se ha calculado el término del mismo. Esta dificultad puede en parte obviarse, considerando la reacción química como una sucesión de etapas en las cuales cambia de posición un solo átomo, así el término se toma solamente como función de las coordenadas de dicho átomo.

En una reacción exotérmica el efecto térmico de la misma es igual a la diferencia entre la energía del término antes y después de la reacción y para que esta pueda darse es necesario que las partículas superen la barrera de potencial existente. Si se considera el movimiento de las partículas como clásico, ellas podrán superar la barrera gracias a la activación térmica, en cuyo caso la velocidad de la reacción dependerá de la temperatura de acuerdo a la ley de Arrhenius, es decir, será

proporcional al $\exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right)$, donde E_a es la altura de la barrera de potencial. Esta dependencia dejará de observarse al considerar la posibilidad de tunelización de las partículas del sistema y será más notable a bajas temperaturas pues así disminuirá la posibilidad del paso de la barrera por activación térmica. Lógicamente el efecto túnel se observará más fácilmente en las reacciones químicas en las cuales deban transportarse partículas “ligeras” como protones o átomos de hidrógeno.

Como ejemplo de este tipo de reacciones figuran las presentadas entre moléculas de acetonitrilo CH_3CN y radicales metilo CH_3 las cuales fueron estudiadas por el químico estadounidense F. Williams, en fases sólida y gaseosa a temperaturas de 70K, y demostraron la tunelización del átomo de hidrogeno. Se observó que a medida que disminuía la temperatura la dependencia de la velocidad de la reacción se alejaba de la predicha por Arrhenius y la velocidad misma se hacia 10^5 - 10^{15} veces mayor que la obtenida por esta ley clásica.

El estudio del efecto túnel permitió no solo determinar la altura de la barrera de potencial E_a , que puede ser obtenida a altas temperaturas, sino su forma de la cual depende la probabilidad de tunelización. Para la reacción arriba mencionada se obtuvo que:

$$U(x) = E_a \exp\left(-\frac{x^2}{b^2}\right)$$

Donde $E_a = 0,48 \text{ eV}$ y $b = 0,64 \text{ \AA}$ (media anchura de la barrera).

Otra interesante manifestación del efecto túnel se presenta en las relaciones donde intervienen isótopos. Como es sabido los isótopos de un mismo elemento se diferencian solo en las masas de sus núcleos, mas no en su carga ya que tienen la misma configuración electrónica. Esto significa que en todas las uniones y reacciones químicas los términos U serán iguales para los diferentes isotopos y dado que la probabilidad de tunelización depende exponencialmente de la masa, la velocidad de la reacción química deberá disminuir con el aumento de la misma en la partícula que se infiltra en la barrera. Por ello en las reacciones en las cuales intervienen átomos o iones de hidrogeno la velocidad de estas deberá disminuir al sustituir el hidrogeno por el deuterio, este efecto fue observado y recibió el nombre de efecto isotópico.

En las soluciones líquidas se presenta con frecuencia el mencionado efecto especialmente en procesos de electrólisis donde los iones en la solución están rodeados de moléculas de agua con fuertes enlaces. Los procesos que ocurren en

los electrodos son muy complejos, la velocidad de los mismos depende generalmente del paso del hidrógeno al electrodo.

En una solución de H^+ este se encuentra unido a las moléculas de agua y en el ánodo ocurre una reacción del siguiente tipo:

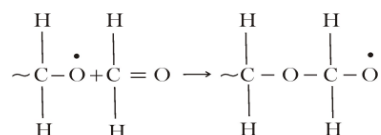


En ella se presenta el traspaso del protón a la superficie del metal, anotando que la barrera de potencial depende no solo de la naturaleza y propiedades químicas del metal y la solución sino de la diferencia de potencial aplicada entre el metal y la solución, la cual es posible variar.

Al pasar el protón por la barrera de potencial a manera de túnel debe observarse el efecto isotópico, esto significa que la velocidad de paso de deuterio hacia el ánodo será menor que la de los protones, con lo cual la solución se irá enriqueciendo con hidrógeno pesado; el agua en la solución se irá convirtiendo en agua pesada. El efecto isotópico, relacionado con la tunelización, se presenta también en reacciones donde intervienen partículas más livianas que el hidrógeno, como son los muones (μ). Estos son sistemas similares al átomo de hidrógeno donde el lugar del protón lo ocupa un μ^+ mesón, que tiene una carga igual a la del protón y una masa nueve veces inferior.

Aunque las propiedades químicas de los muones son muy similares a las del hidrógeno las velocidades de las reacciones deben ser diferentes debido al efecto túnel. En efecto la velocidad de la reacción de los muones ($H_2O_2 + \mu \rightarrow \mu O + H_2O$) es cien veces superior a la velocidad de la reacción con hidrogeno ($H_2O_2 + H \rightarrow HO + H_2O$).

Físicos soviéticos observaron un tipo de reacción química en la cual la tunelización la realiza no un átomo separado de hidrógeno, sino una molécula completa, esto ocurrió al analizar la polimerización del formaldehido CH_2O , la cual ocurre de la siguiente forma:



La valencia libre del radical CH_2O , es decir, el electrón desapareado se concentra en el átomo de oxígeno. Cuando al final de la cadena, en la cual se ubica este radical, se acerca la molécula del formaldehido ocurre una reorganización de electrones, una de las uniones del enlace doble entre O y C se rompe y se transforma en la unión entre O y C, obteniéndose un nuevo radical que se une a la cadena haciendo que esta aumente un eslabón. Al final de la cadena se

encontrará nuevamente un radical listo para una nueva reacción; cuando por alguna causa esto no ocurre se suspende el crecimiento de la cadena.

Al efectuar esta reacción a bajas temperaturas, del orden de 10K, se observó que la velocidad de unión de los eslabones a la cadena ($\sim 10^{-3}$ s) no dependía de la temperatura, es decir, la ley de Arrhenius no era válida, pues según ella la velocidad a dicha temperatura debía ser $\sim 10^{30}$ años. Por ello se concluyó que en las mencionadas condiciones tenía lugar la tunelización de la molécula de CH_2O .

Finalmente se enunciarán otras importantes reacciones en las cuales se ha detectado el mecanismo de tunelización:

- Reacción entre hemoglobina y monóxido de carbono, causante de intoxicación y muerte ya que como resultado de ella la hemoglobina pierde su capacidad de transportar oxígeno. A bajas temperaturas ($\sim 10\text{K}$) la velocidad de la reacción no depende de estas lo cual, en este caso, como se ha visto se explica por la tunelización de las moléculas de CO.
- La llamada inversión de amoníaco (NH_3), el cual tiene una estructura triangular piramidal con el átomo de N fuera del plano de los tres átomos de H. El efecto túnel presentado en el amoníaco fue base para la construcción del primer máser.

Se ha visto que inclusive a muy bajas temperaturas, gracias en buena medida al efecto túnel, pueden ocurrir reacciones entre partículas pesadas, cosa que hace poco parecía imposible. Esto permite replantear las teorías sobre el nacimiento y la propagación de la vida en el universo, o cuando menos tener en cuenta la posibilidad de la formación “en frío” de moléculas y estructuras orgánicas complejas.

Se espera haber mostrado, con las limitaciones de espacio, algunos de los principales aspectos del efecto túnel en Química y su relación con otros interesantes fenómenos físico-químicos. Agradezco a la Facultad de Ciencias y Educación de la Universidad Distrital su apoyo para participar en este evento.

Bibliografía

- Yu P. y Cardona M. (1999). *Fundamentals of Semiconductors*, 2nd ed. Springer-Verlag, Berlin.
- McKelvey, J. (1989). *Física del estado sólido y de semiconductores*, 3^a ed. Limusa, México.

- Guerasimov, Y. *et al.* (1980). *Curso de Química Física*, Tomo II. Mir, Moscú.
- Moore, W. (1986). *Fisicoquímica Básica*. Prentice-Hall, México.
- Kaganov, M. (1979). *Elektrony Fonony Magnony*. Nauka, Moskva (en ruso).
- Bohm, D (1952). *Quantum Theory*. Prentice-Hall, New York.
- Bell, R. (1980). *The Tunnel Effect in Chemistry*. Chapman and Hall, London.