

El agua, una sustancia tan común como sorprendente

Jorge Peón Peralta

El agua es quizá el único líquido capaz de mantener en solución a gran variedad de especies químicas, las cuales tienen que conservar un equilibrio preciso para hacer que se lleven a cabo procesos biológicos de gran complejidad.

El agua es una de las sustancias más abundantes en nuestro alrededor. Este esencial líquido representa una de las moléculas (H_2O) que más prevalecen en el Universo entero, ocupando el segundo lugar después de la molécula de hidrógeno (H_2). Como es sabido, el agua es también la sustancia más importante para el desarrollo y el sostén de la vida en nuestro planeta; de hecho, la mayoría de los procesos biológicos se llevan al cabo gracias a ella. Como dato adicional, podemos recordar que, aproximadamente, 70 por ciento de la superficie terrestre está cubierta por el líquido. A esto se suma el hecho de que la mayor parte de la energía solar que obtiene la superficie de nuestro planeta se absorbe gracias a su contenido de agua y su evaporación, y la consecuente formación de nubes es uno de los principales factores que coadyuvan a estabilizar la temperatura terrestre.

Desde la perspectiva de la química, el agua tiene una enorme capacidad para disolver otras sustancias, por lo cual se le ha dado el sobrenombre de “disolvente universal”. Gracias a tal capacidad, es posible mantener en forma de disolución acuosa una enorme diversidad de compuestos; esto resulta esencial en muchos ámbitos como, por ejemplo, los ecosistemas acuáticos y los medios acuosos y coloidales de los tejidos y las células. Es esencial señalar que las propiedades del agua están determinadas, en el nivel más fundamental, por la geometría de su molécula y por la naturaleza de los átomos que la forman. A continuación se presenta una

breve explicación acerca de la constitución de este vital compuesto, para luego referirnos a sus propiedades fisicoquímicas.

La estructura molecular del agua

En cualquiera de sus estados de agregación, el agua da la apariencia de ser una sustancia relativamente simple; sin embargo, tras esta primera impresión, se esconde un importante grado de complejidad a nivel microscópico. En la Figura 1 se muestra la imagen de una molécula de H_2O individual; en ella se aprecia que los dos átomos de hidrógeno se encuentran unidos a un átomo de oxígeno, ambos del mismo lado, dándole a la molécula una forma en V, con un ángulo de 104.5 grados entre los enlaces O-H.

Dicha geometría se determina por el ordenamiento de los pares electrónicos en la molécula: existe un total de 8 electrones de valencia o “exteriores” en el agua; de estos electrones, dos pares corresponden a enlaces oxígeno-hidrógeno (donde cada átomo aporta un electrón al enlace), mientras que los otros dos pares no participan en los enlaces y se consideran como

pares de electrones “libres” o “no compartidos” del oxígeno. Al existir cuatro pares de electrones alrededor del núcleo del átomo de oxígeno, éstos se tienden a distribuir en tres dimensiones, manteniendo la mayor distancia posible entre ellos para que las fuerzas de repulsión sean mínimas. El resultado de tales interacciones es que los átomos de hidrógeno, junto con los pares electrónicos de los enlaces H-O, quedan proyectados de un mismo lado de la molécula, en tanto que los dos pares “libres” se distribuyen en el resto del espacio. Como se verá más tarde, muchas de las propiedades del agua se deben a esta geometría molecular angulada; y es justo dicha disposición atómica la que le permite al agua interactuar de maneras muy específicas con otras moléculas, así como con iones (átomos o moléculas cargados eléctricamente) e incluso con moléculas biológicas de gran tamaño.

Otra de las características más importantes del agua tiene que ver con el grado de *polaridad* o de separación de carga eléctrica que existe en la molécula. En la parte central de la Figura 1 se presenta la imagen de una molécula de agua, donde se aprecia la distribución de carga eléctrica. La densidad de la nube de electrones (que rodea y mantiene unidos a los núcleos de hidrógeno y oxígeno) se indica con una escala de colores: las zonas en rojo corresponden a lugares con mayor carga negativa, gracias a una mayor densidad de la nube electrónica; las zonas en verde indican una menor densidad electrónica. Como se puede ver, la distribución de carga es asimétrica, ya que los dos átomos de hidrógeno tienen una densidad electrónica muy baja (y por lo tanto, una carga parcial positiva, δ^+), en tanto que del lado del

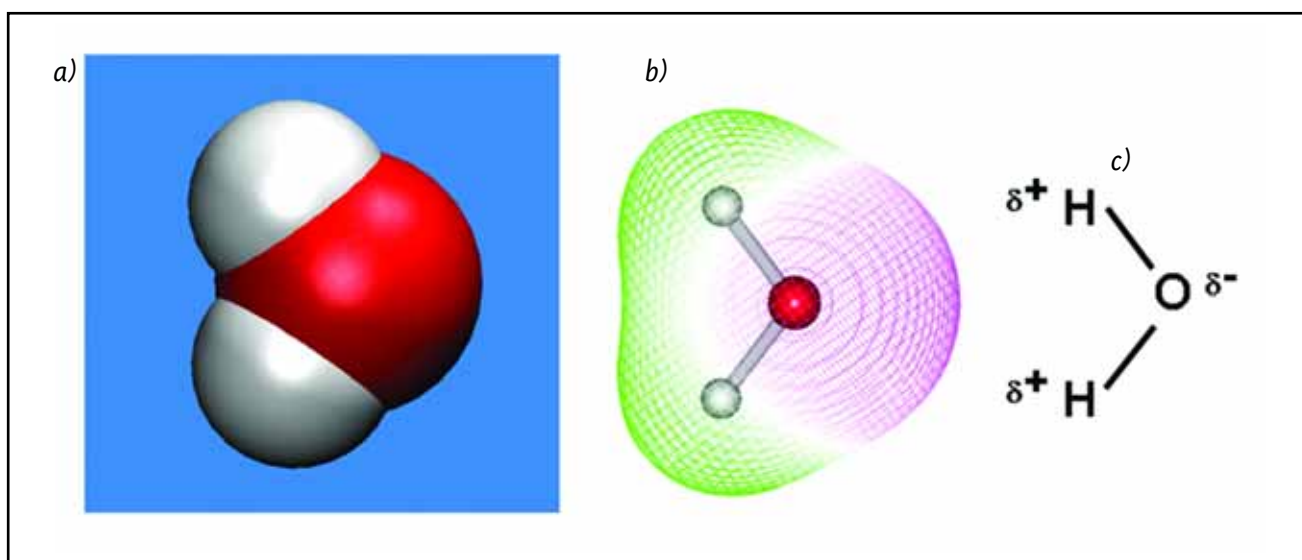


Figura 1. a) Diagrama de una molécula de agua individual. b) Mapa de colores del potencial electrostático. c) Esquema simplificado del agua indicando cargas parciales en cada átomo.

átomo de oxígeno se encuentra un volumen de alta densidad electrónica (y por lo tanto, una carga eléctrica parcial negativa, δ^-).

La distribución de la densidad electrónica en el agua obedece a dos razones. La primera es la geometría misma de la molécula. Como se ha mencionado, los dos pares electrónicos no compartidos del oxígeno se mantienen, aproximadamente, del lado opuesto a los dos átomos de hidrógeno, que comparten su único electrón con el oxígeno, formando un enlace químico. La segunda razón tiene que ver con la naturaleza de los enlaces oxígeno-hidrógeno. El núcleo del átomo de oxígeno tiene una capacidad significativamente mayor que el núcleo del hidrógeno para atraer los electrones de un enlace O-H hacia su lado de la molécula (el oxígeno es un átomo más *electronegativo* que el hidrógeno). Debido a esto, los electrones involucrados tienden a ubicarse más cerca del oxígeno en los dos enlaces oxígeno-hidrógeno. Ambos factores redundan en la asimetría de la distribución de carga, como se muestra en la Figura 1.

A las moléculas con una separación espacial de carga como la del agua se les conoce como compuestos *polares* (pues tienen polos de carga eléctrica). En el lado derecho de la Figura 1 se resume esta cualidad marcando dos cargas parciales positivas a los átomos de hidrógeno, y una carga parcial negativa al átomo de oxígeno. Esta última simplificación es muy útil para comprender una gran variedad de las propiedades del agua.

En conjunto, la polaridad de la molécula del agua y su especial geometría determinan todas las demás propiedades del agua. A continuación se presenta una muy breve revisión de algunas de ellas, haciendo énfasis en cómo el comportamiento en el nivel molecular determina los efectos que observamos en el nivel macroscópico.

Los puentes de hidrógeno en el agua

Por su estructura, el agua es un compuesto prototípico para la formación de los llamados *puentes* o *enlaces de hidrógeno*.

En un puente de hidrógeno, dos átomos con cargas parciales negativas interactúan, atrayéndose de manera indirecta a través de un átomo de hidrógeno de carga parcial positiva.

El átomo de hidrógeno, que funciona como puente, se encuentra unido covalentemente (compartiendo electrones) a un

LA CONFIGURACIÓN ELECTRÓNICA DEL AGUA

La configuración electrónica más aceptada hoy en día para la molécula del agua, y que es capaz de describir cualitativamente la distribución electrónica descrita en los párrafos anteriores, considera que el átomo de oxígeno se encuentra en lo que se conoce como una *hibridación tipo sp^2* (dos de los orbitales –las regiones del espacio donde se pueden encontrar los electrones– tipo $2p$ del oxígeno se combinan con el orbital $2s$ para formar tres orbitales tipo sp^2 , quedando un orbital tipo p no hibridizado). De esa manera, dos de los orbitales sp^2 participan en los enlaces con los átomos de hidrógeno, mientras que, de los dos pares libres de electrones, uno está asociado al tercer orbital sp^2 del oxígeno, y el par remanente se encuentra asociado al orbital tipo p no hibridizado del oxígeno.

átomo electronegativo como oxígeno o nitrógeno. La polaridad intrínseca de tal enlace hace posible que el átomo de hidrógeno pueda “sentir” al mismo tiempo una atracción electrostática ejercida por un segundo átomo electronegativo, el cual se encuentra ubicado en otra molécula. En un puente de hidrógeno, al átomo electronegativo unido de forma covalente al hidrógeno se le conoce como el “átomo donador”; al otro átomo electronegativo se le conoce como “aceptor” del puente de hidrógeno.

Uno de los ejemplos más sencillos y a la vez más importantes de la formación de puentes de hidrógeno involucra a dos moléculas de agua, según se indica en la Figura 2. En este *dímero* o par de moléculas unidas que conforman H_2O se aprecia que el átomo de hidrógeno de una de las moléculas es atraído por el oxígeno de la otra molécula de agua, sirviendo así como un intermediario o puente para la interacción entre los dos oxígenos. Adicionalmente, las moléculas de agua pueden participar de manera simultánea en puentes de hidrógeno con varias otras moléculas de agua. Tal comportamiento se presenta tanto en el estado líquido como en el sólido. Es importante subrayar que, aparte de las cargas parciales de los átomos del agua ($H^{\delta+}-O^{\delta-}-H^{\delta+}$), como se ha mencionado, es la *forma geométrica angular* de la molécula lo que permite a una misma molécula funcionar como “donadora” del hidrógeno de hasta dos

puentes, al tiempo que como “aceptora” del átomo de hidrógeno en la interacción con otras moléculas de agua. En la Figura 2 se incluye el diagrama de un conjunto de moléculas de agua en el seno del líquido, donde es posible apreciar este fenómeno.

La energía asociada a la formación o ruptura de un puente de hidrógeno individual es de unas 5 kilocalorías por mol, lo cual equivale a aproximadamente un 5 por ciento de la energía de un enlace químico de tipo covalente. Esto hace que a los puentes de hidrógeno se les clasifique como interacciones de tipo débil; de hecho, en el agua líquida dichos puentes son lo suficientemente frágiles como para que exista una continua formación y ruptura de los enlaces de hidrógeno. Aunque se les considere interacciones débiles en comparación con los enlaces covalentes, la energía de un puente de hidrógeno es significativamente mayor que la energía con la que interactúan las moléculas de otros líquidos, por ejemplo el cloroformo, el éter y la acetona.

El tiempo de vida promedio de un enlace de hidrógeno es extremadamente breve: de alrededor de unas diez billonésimas de segundo. La rápida ruptura y formación de interaccio-

nes agua-agua hace que exista una incesante fluctuación de la estructura interna del líquido. Junto con la polaridad, esta dinámica hace que el agua sea un excelente fluido para la realización de una gran diversidad de procesos químicos; en particular, para aquellos que requieren la separación y la difusión de especies químicas con cargas eléctricas netas o parciales. Muchos de estos procesos químicos tienen que ver con procesos biológicos como la fotosíntesis, la síntesis de trifosfato de adenosina (ATP), el movimiento de iones a través de las membranas celulares, etcétera.

La disolución de iones y de compuestos polares

La polaridad de la molécula de H_2O le permite tener interacciones de tipo electrostático con muchas otras especies químicas que tengan algún grado de polaridad; o bien, con cargas eléctricas netas en sus átomos. Tal es el caso de los compuestos iónicos.

La forma sólida de dichos compuestos está constituida por dos especies en un arreglo cristalino: un catión, de carga positiva, y un anión, de carga negativa. En el caso del cloruro de sodio, la sal de mesa común ($NaCl$), los iones corresponden al anión cloruro (Cl^-) y al catión sodio (Na^+). En la Figura 3 se incluye el diagrama de un cristal de $NaCl$, donde se distinguen ambas especies formando un empaquetamiento tridimensional perfectamente ordenado en el sólido.

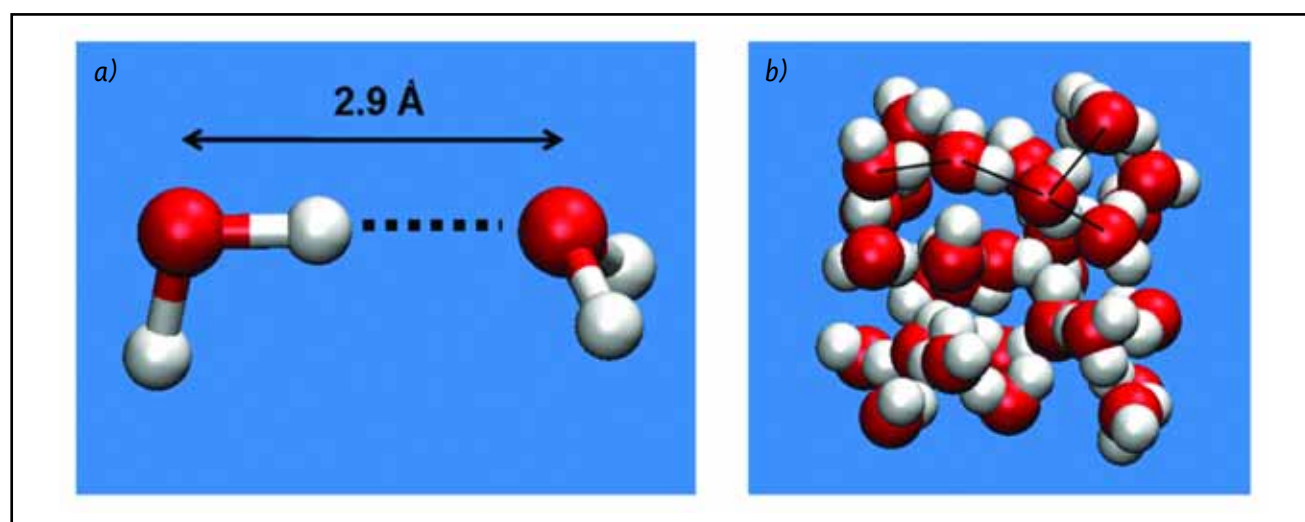


Figura 2. a) Esquema de un dímero de agua. La línea punteada representa la interacción tipo puente de hidrógeno en el dímero. b) Esquema de un grupo de moléculas en el seno del líquido. Las líneas continuas en el líquido muestran la formación de cadenas de puentes de hidrógeno. También se indica la distancia oxígeno-oxígeno en un puente medida en ángstroms (diezmillonésimas de milímetro).

La capacidad del H_2O para interactuar fuertemente con los aniones y cationes hace posible que muchos compuestos iónicos puedan disolverse en el agua. En la Figura 3 también se esquematiza la manera como el agua puede separar las cargas de los iones sodio de la carga de los cloruros al disolverse un cristal de NaCl . En la disolución, los aniones quedan rodeados por moléculas de agua con los átomos de hidrógeno proyectados hacia la carga negativa, mientras que los cationes se rodean de los oxígenos del agua. Por otro lado, cuando una molécula polar se encuentra en solución acuosa, las diferentes zonas parcialmente cargadas de ésta interactúan con moléculas de agua orientadas de forma adecuada para neutralizar las cargas parciales.

En conjunto, estas interacciones posibilitan el hecho de que muchos compuestos puedan mantenerse en difusión libre en una solución acuosa. Por ejemplo, en los medios tisular y celular pueden existir decenas de diferentes especies iónicas y polares conviviendo en una misma disolución. Es probable que el agua sea el único líquido con la capacidad de mantener en solución a tal variedad de especies, las cuales tienen que conservar un equilibrio preciso para hacer posible que se lleven a cabo procesos biológicos de enorme complejidad.

El agua en el estado sólido

En el estado sólido, en el cual las moléculas prácticamente carecen de movimientos de traslación y rotación, el agua es capaz de agregarse formando puentes de hidrógeno per-

manentes. Existen once formas cristalinas o fases sólidas diferentes para el agua. Éstas difieren entre sí por la manera particular como las moléculas se empaquetan en el espacio para formar un sólido. A la existencia de las diversas formas cristalinas se le conoce como *polimorfismo* del hielo.

Cada uno de los mencionados once estados de agregación puede formarse en cierto intervalo de presión y de temperatura; sin embargo, sólo la fase hielo Ih representa la forma estable a las condiciones de la atmósfera de la Tierra; de ahí que tanto el hielo como la nieve que vemos comúnmente se encuentran en dicha forma sólida. Un aspecto constante en todas las fases sólidas del agua es que cada átomo de oxígeno establece dos enlaces de hidrógeno como “donador” y que, simultáneamente, participa como “aceptor” en otros dos puentes de hidrógeno. Lo anterior se puede apreciar en la Figura 4, donde se muestra el ordenamiento molecular en el hielo tipo Ih. En esta forma sólida, todas las moléculas de H_2O se encuentran en un ambiente idéntico, formando enlaces de hidrógeno en las direcciones de un tetraedro. En la Figura mencionada también se incluye un diagrama más extendido que muestra cómo el

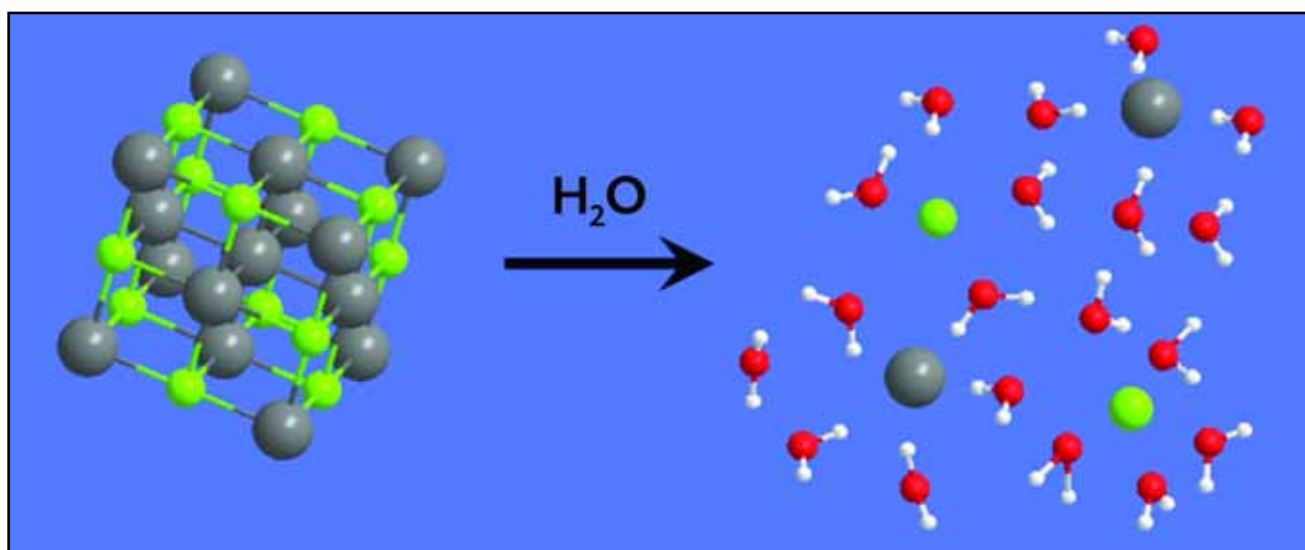


Figura 3. Esquema de la disolución de un cristal de cloruro de sodio. Los iones cloruro (Cl^-) se indican en gris y los iones sodio (Na^+) en verde.

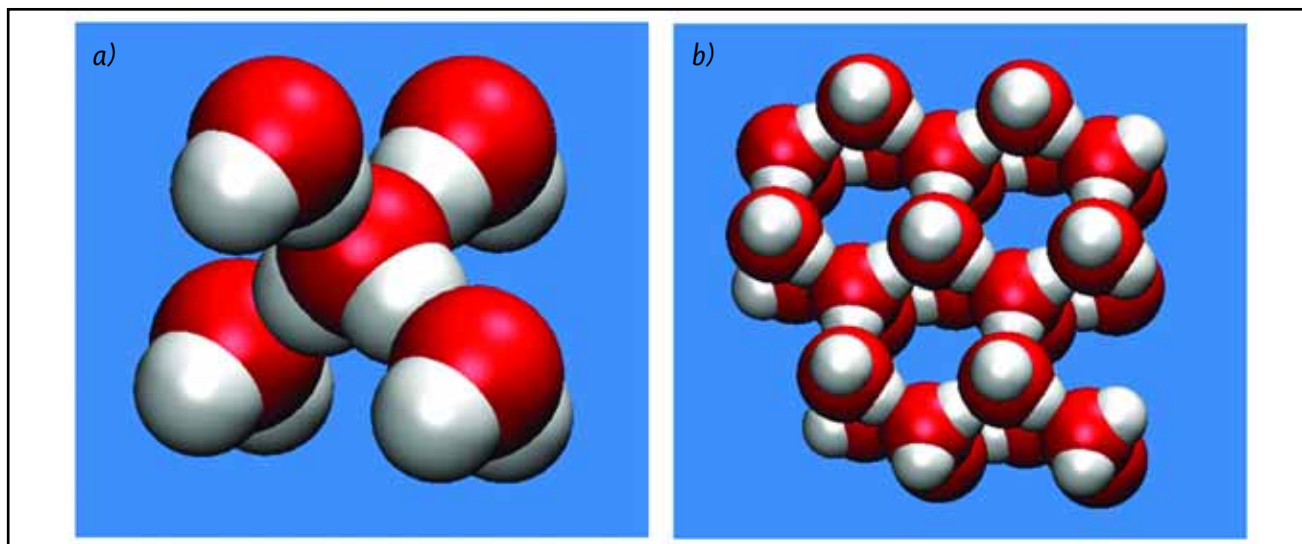


Figura 4. Diagrama del arreglo cristalino en el hielo. *a)* Formación de cuatro enlaces de hidrógeno alrededor de la molécula de agua central. *b)* Red cristalina de hielo. Nótese el arreglo hexagonal.



arreglo periódico de los átomos da origen a una malla de forma hexagonal con los átomos de oxígeno en los vértices.

Los puentes de hidrógeno presentes en el hielo Ih hacen que se obtenga, para este sólido, un empaquetamiento atómico de muy baja densidad (0.917 gramos por centímetro cúbico). Tan baja densidad se debe a que los oxígenos pueden interactuar a una distancia relativamente grande (gracias al hidrógeno que funciona como mediador). Es posible calcular que sólo aproximadamente un tercio del espacio disponible en realidad es ocupado por un oxígeno o un hidrógeno. Este empaquetamiento de átomos implica que para la misma cantidad de masa, el hielo ocupa aproximadamente 9 por ciento más de espacio que el agua líquida. Lo anterior tiene un efecto que todos podemos reconocer cotidianamente: los cubos de hielo flotan en nuestras bebidas y los icebergs flotan en los océanos.

Resulta claro que el agua es uno de los mejores ejemplos de cómo nuestra realidad macroscópica está determinada por la manera en que los átomos y las moléculas se relacionan entre sí.

Tensión superficial

Las moléculas de agua que se hallan en la frontera o interfaz entre una fase líquida y una fase gaseosa como el aire, no tienen la misma oportunidad de formar puentes de hidrógeno que las moléculas que se encuentran dentro del líquido y que están completamente rodeadas por otras moléculas de H_2O . Esto ocasiona que las moléculas en la interfaz estén sometidas a una fuerza hacia el seno del líquido que no está balanceada del lado de la fase gaseosa. La resultante es que el área superficial de un cuerpo de agua tiende a reducirse al mínimo, para reducir el desbalance de fuerzas. En otras palabras, al minimizar el área superficial se minimiza el número de moléculas con interacciones “faltantes”. Esta tendencia a reducir el área, deriva en una tensión en la interfaz líquido-gas conocida como *tensión superficial*.

Aunque el fenómeno está presente en todos los líquidos, el caso del agua es particular, debido a que la energía de los puentes de hidrógeno le dan una tensión superficial significativamente mayor que la mayoría de las sustancias. La tensión superficial del agua a 25°C es de 72 milinewtons por metro (como punto de comparación, la tensión superficial del alcohol etílico es de tan sólo 22.4 milinewtons por metro). La elevada tensión superficial del agua tiene varias implicaciones importantes. Además de permitirles a algunos insectos caminar por la superficie de los lagos, hace posible que las corrientes de aire sean capaces de inducir

un movimiento en la superficie de los cuerpos de agua. Este movimiento redunda en la formación de olas, las cuales son esenciales para la difusión de oxígeno en los mares y océanos.

Propiedades térmicas del agua

La capacidad calorífica es la cantidad de energía en forma de calor que se requiere para elevar en un grado centígrado la temperatura de una sustancia. Dicha propiedad tiene que ver con la eficiencia con la que la energía absorbida redunda en un incremento de la energía cinética o energía de movimiento de las moléculas en una sustancia. El agua resulta ser uno de los líquidos con mayor capacidad calorífica que se conocen: se requiere una caloría por cada grado centígrado que se eleva la temperatura de un gramo de agua (aproximadamente tres veces mayor que en los alcanos, por ejemplo). Esto



se debe a que las interacciones $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}$ por puentes de hidrógeno son significativamente más fuertes que las presentes en la mayoría de los líquidos. Gracias a ello, cuando un cuerpo de agua absorbe calor, una buena parte de esta energía no se manifiesta directamente en los movimientos de las moléculas, sino en la deformación y la ruptura de los enlaces de hidrógeno. El hecho de que el agua pueda absorber una gran cantidad de calor sin incrementar en gran medida su temperatura la hace un excelente fluido para remover energía térmica de cuerpos muy calientes, como los motores de combustión interna.

La hidratación de las proteínas

Una de las facetas más recientemente reconocidas del agua tiene que ver con su participación en la función de las proteínas. Estas moléculas biológicas son por cadenas (polímeros) formadas por cientos de unidades (monómeros) conocidos como aminoácidos, y son compuestos esenciales para todos los seres vivos, ya que participan de muy diversas formas en la fisiología de los organismos.

En general, las proteínas tienen una estructura tridimensional compleja que suele incluir sitios de reconocimiento de otras moléculas, así como “sitios activos” donde se realizan las transformaciones químicas. Las moléculas de agua juegan un papel esencial en la complicada estructura de estas macromoléculas. Gracias a su capacidad de formar enlaces de hidrógeno, el agua

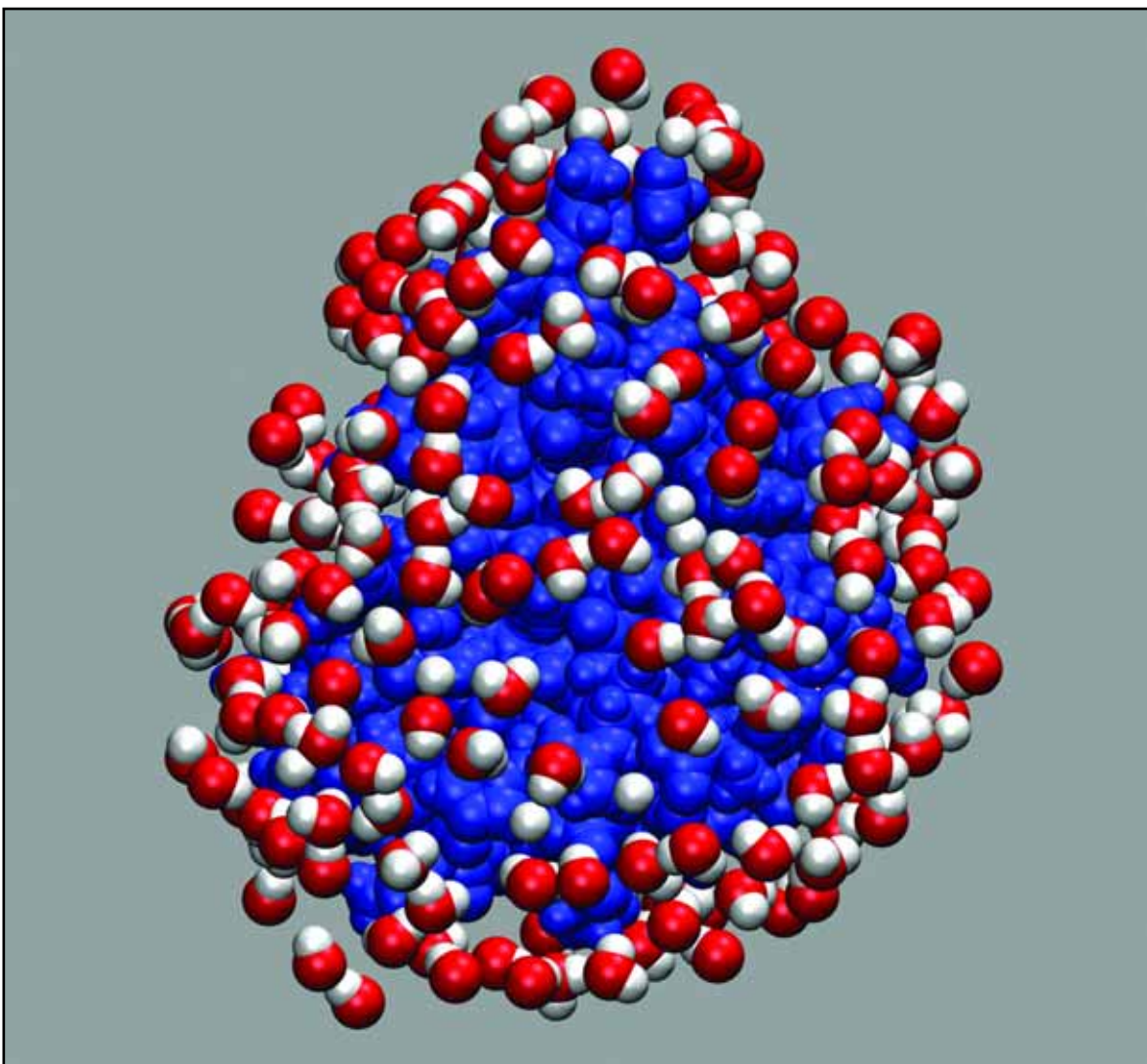


Figura 4. Imagen de una proteína (azul) con un grupo de moléculas de agua interactuando con aminoácidos de su superficie.

puede estabilizar la estructura proteica mediante interacciones con los aminoácidos polares y iónicos con los que tiene contacto en la superficie de la proteína. Es tal la influencia del agua, que se ha demostrado que las enzimas pierden totalmente su funcionalidad cuando no existe una cantidad suficiente de agua en el medio.

En la Figura 5 se incluye el diagrama de una proteína junto con algunas moléculas de agua que se encuentran formando enlaces de hidrógeno con aminoácidos en la superficie. Como se aprecia, también es frecuente que una o más moléculas de agua funcionen como elementos de conexión entre regiones diferentes de la proteína. Las moléculas de agua logran esa acción al formar puentes de hidrógeno simultáneos en dos puntos diferentes de la estructura; con esto, prácticamente se puede considerar que el H_2O se integra a la estructura de la macromolécula.

Conclusión

Es fascinante descubrir que las propiedades de este pequeño compuesto de tan sólo tres átomos están totalmente determinadas por un arreglo molecular específico y cierta distribución electrónica. Como hemos podido ver, las propiedades físicas y químicas del agua son muy particulares y definen un caso único entre todas las sustancias químicas. Estas propiedades tienen una enorme relevancia en la definición del mundo en que vivimos; no hay duda de que nuestra realidad sería muy diferente si no fuéramos organismos basados, en todos los niveles, en nuestra convivencia con el agua.

Jorge Peón Peralta es doctor en ciencias con especialización en fisicoquímica por la Ohio State University. Realizó estudios posdoctorales en el Instituto Tecnológico de California y es investigador del Instituto de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM, desde 2003. Entre sus principales aportaciones científicas se encuentran los primeros estudios directos de la dinámica de la hidratación de proteínas mediante técnicas de pulsos láser ultracortos.

jpreon@servidor.unam.mx

Bibliografía

- Kusalik, P. G. e I. M. Svishchev (1994), "The spatial structure in liquid water", *Science*, 265, 1219-1221.
- Soper, Alan K. (2002), "Water and Ice", *Science*, 297, 1288-1289.
- Bloomfield, Louis A. (2000), "Working Knowledge: Cleaning Agents", *Scientific American*, abril, 88-89.
- Levy, Yaakov y José N. Onuchic (2004), "Water and proteins: A love-hate relationship", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 101, 3325-3326.

