

Proyecto MOSSNOHO

"La investigación española está en el lugar y en el momento adecuados para la simulación por ordenador aplicada al agua"

Carlos Vega de las Heras es catedrático de Química Física de la Universidad Complutense de Madrid. Dirige el grupo de Termodinámica Estadística de Fluidos Moleculares que participa en el proyecto de Modelización y Simulación de Sistemas no Homogéneos en Materia Condensada (MOSSNOHO)

Algo tan aparentemente sencillo como un vaso de agua, contiene millones de moléculas sobre las que aún queda mucho por saber. Los investigadores tratan de descubrir el por qué de las transformaciones del agua entre los estados líquido, sólido o gaseoso. La mejora de modelos que la describan puede ser la llave de futuras investigaciones sobre las moléculas que se disuelven en ella, tanto inertes como vivas.

Elena Santaolalla Pascual

Nos mantiene vivos, nos rodea, forma parte de nuestro cuerpo y nos limpia. El agua es la poción mágica que permite que la vida tal y como la conocemos en nuestro planeta, con su diversidad, ritmos y colorido, se siga desarrollando minuto a minuto. Mientras que algunos bucean en ella para descubrir los tesoros que cubre, otros se zambullen en el universo de moléculas que la componen para entenderla mejor. Pese a su aparente simpleza el agua en sus diferentes estados alberga propiedades macroscópicas aún por descubrir.

Si alguien puede decir que una serie de televisión ha tenido importancia en su vida, ese sería el catedrático de Química Física de la Universidad Complutense de Madrid Carlos Vega de las Heras. Corría el año 1981 cuando la obra de divulgación científica Cosmos producida por Carl Sagan, le enganchaba frente a la pantalla y encendía en él la inquietud que provoca la curiosidad. La formación del universo, los átomos, las primeras moléculas, el origen de la vida... Hoy, con la serie completa en DVD en la estantería de su casa y muchos años de formación, trabajo e investigación, dirige el grupo de Termodinámica Estadística de Fluidos Moleculares en la Facultad de Ciencias Químicas de dicha universidad.

En el mismo despacho que antes ocupó como profesor ayudante, titular y catedrático desde 2005, sigue desarrollando sus investigaciones dentro del campo de la Termodinámica Estadística o, como él mismo la denomina, "la sociología de la materia". Desde hace 10 años su grupo se ha dedicado en el estudio del comportamiento de moléculas de hidrocarburos, cristales líquidos y, con especial interés desde 2003, en las del agua. Han hecho importantes aportaciones gracias a la simulación por ordenador, concretamente en el campo de Diagramas de Fases de los gases. La Comunidad de Madrid ha ayudado a aunar los esfuerzos de su grupo y los de otros seis - Universidad Carlos III, Autónoma, Universidad Nacional a Distancia (UNED) el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), entre otros- para la puesta en marcha del proyecto de Modelización y Simulación de Sistemas no Homogéneos en Materia Condensada (MOSSNOHO) dentro del cual el grupo del profesor Vega de las Heras se coordina de manera más estrecha con sendos equipos de la UNED (profesor Luis Sesé) y del CSIC (profesor Rafael Ramírez) para estudiar los efectos cuánticos en el agua.

Más que H2O

¿Por qué hace falta una caloría para calentar un gramo de agua? ¿Por qué el agua congela a 0 grados centígrados y hierve a 100 y no a otra temperatura? Como explica Carlos Vega, para poder predecir las propiedades macroscópicas que se ven, hay que entender el comportamiento colectivo de un número elevado de moléculas. La Termodinámica Estadística ayuda a, una vez conocida "la psicología del individuo" o la molécula, conocer la sociedad de la que forma parte. Es en este punto donde entra la informática con su aportación en el campo de las simulaciones por ordenador.

Como resalta De las Heras, "se trata de una herramienta complementaria que ayuda e incluso permite sustituir al experimento en el laboratorio ya que el ordenador facilitará predecir propiedades con el consiguiente ahorro de tiempo. La simulación ayuda a predecir y a entender los comportamientos que estudiamos aportando además una imagen del proceso estudiado. Cuando estudiamos el equilibrio líquido/ vapor de agua, por ejemplo, el ordenador nos permite tener un ojo microscópico para ver el comportamiento de esas moléculas que se mueven por unas determinadas fuerzas. La mezcla de la energía cinética -que es la temperatura- con las fuerzas entre las moléculas, provocan las transformaciones del agua. El ordenador resuelve las ecuaciones de movimiento", explica Carlos Vega. Sin embargo, pese a la ayuda de la tecnología, es necesaria la utilización de datos que describan correctamente cómo son las fuerzas de interacción de dos moléculas de agua ya que de lo contrario lo que se vería en el ordenador no sería una descripción fidedigna del proceso real. Sobre este punto se asientan todos los esfuerzos que vienen realizando desde el grupo que coordina Carlos Vega y en el que también están implicados los doctores Fernández Abascal y González MacDowell; los doctores Sanz y González Noya y los estudiantes de doctorado María Martín y Juan Luis Aragónés: perfeccionar la descripción de cómo son esas fuerzas

De ahí la importancia de su aportación en la elaboración de un modelo de agua que permita predecir correctamente las propiedades, tanto de los diferentes tipos de hielo que existen como del equilibrio líquido- sólido del agua. Su equipo y él han logrado nuevos modelos que predicen correctamente y por primera vez, el Diagrama de Fases y así han podido empezar a estimar propiedades nuevas del agua desconocidas hasta la fecha. Dentro del proyecto MOSSNOHO, la Comunidad de Madrid les ha dotado de equipamiento informático que les coloca a la vanguardia de simulación en Europa. Los sistemas de computación han permitido multiplicar el volumen de procesamiento con la consiguiente rapidez en los cálculos y avance en los trabajos.

En este punto entra la colaboración de otros grupos en Madrid con experiencia en estudiar los efectos cuánticos para aplicarlos al estudio del H₂O. "Estamos poniendo a punto ya programas que nos van a permitir estudiar efectos cuánticos en el agua que aparecen cuando ésta se encuentra a muy baja temperatura. Entender dichos efectos es tremendamente importante sobre todo cuando uno se interesa por el agua interestelar ya que fuera de la Tierra está a muy bajas temperaturas, en algunos casos incluso a 200 grados bajo cero. Ahí aparecen ya importantes efectos cuánticos en el agua y por tanto la necesidad de la colaboración con grupos de investigación con experiencia en este tipo de estudios. Estamos a punto de obtener resultados muy importantes para la ciencia interestelar, para entender el comportamiento del agua. Se sabe que hay agua en distintas lunas de Saturno, en Marte o en el espacio interestelar, bien en forma de hielo o en forma vítrea (agua amorfa). Simulación cuántica y por ordenador se dan la mano para entender propiedades del agua en estas condiciones. Por otro lado hay grupos dentro del proyecto MOSSNOHO que están estudiando cómo es la interfase entre el agua líquida y el vapor. Cómo se colocan las moléculas en dicha interfase. Son los grupos del profesor Enrique Chacón (CSIC) y el profesor Tarazona (Universidad Autónoma). También vamos a colaborar con ellos en esa dirección", resalta el profesor Vega.

La comprensión del agua puede ser tremendamente importante para entender muchas de las propiedades de los seres vivos porque ésta nos compone en un 70%. En la última década ha habido un importantísimo despegue de las simulaciones sobre todo en lo referente a moléculas biológicas que están en agua. Por lo tanto antes es necesario tener un buen modelo de las fuerzas entre los átomos de la proteína, entre las moléculas de agua y un buen modelo de las fuerzas entre ambas. Así se está intentando obtener un modelo de potencial -modelo de fuerzas- que describa correctamente el agua y que pueda utilizarse en un futuro en simulaciones de ordenador de moléculas biológicas. Se podría entender la estructura tridimensional de las proteínas, su forma espacial, explicar fenómenos como el porqué de la desnaturalización de proteínas o los cambios en sus formas. Hoy por hoy eso es futuro. Pero para lograrlo es necesario una buena base, unos modelos correctos. "Un modelo que sea capaz de describir los hielos del agua va a ser un modelo que proporcione mejores predicciones cuando se utilice dentro de simulaciones de moléculas biológicas". Esto, lo tiene claro Carlos Vega, para quien "la próxima parada del autobús podría ser incorporar moléculas biológicas dentro de este esquema de la Termodinámica Estadística y la simulación por ordenador".

15 tipos de hielo diferente

Si a algo han prestado especiales esfuerzos ha sido a los diferentes tipos de hielo que se pueden formar. Si bien en la Tierra sólo se conoce el hielo que refresca las bebidas o mantiene los alimentos y al que los químicos se refieren como Hielo 1, el agua tiene la propiedad de cristalizar en distintas estructuras sólidas que son tan diferentes entre sí como pueden serlo el carbono del diamante y el carbono que compone el grafito con el que escriben los lapiceros. Ahora bien, explica Vega, si a ese hielo se le somete a una fortísima presión en un contexto de bajas temperaturas, entonces se transforma en un otros hielos distintos (hielo I, hielo III...). Tanto sus propiedades como su estructura tridimensional son distintas a la del hielo I ya que en el sólido no sólo influye la composición química sino cómo están ordenadas las moléculas. El agua es la campeona en sólidos porque tiene 15 estructuras sólidas distintas y se sabe que en el Sistema solar el hielo, el agua en fase sólida, va a estar presente en alguna de esas otras estructuras cristalinas, formando esos hielos que de manera natural no encontramos en nuestro planeta.

El grupo de Termodinámica Estadística de Fluidos Moleculares ha sido pionero en estudiar estos hielos sirviéndose de la simulación. Han sido pioneros en describir correctamente los hielos y el Diagrama de Fases con las transiciones entre las distintas estructuras cristalinas y proponiendo modelos de agua que fundieran a 0 grados. Como ocurre en todo, este importante paso no podría haberse dado sin modelos anteriores que se venían utilizando tradicionalmente y que han mejorado. Esto les valió la portada de ejemplar de mayo de 2007 de la revista *Physical Chemistry and Chemical Physics*, publicada por la Royal Society of Chemistry.

Una de las primeras aplicaciones que ha tenido todo este trabajo ha sido estudiar y corroborar por simulación la existencia de una capa líquida de agua que está en la superficie del hielo incluso a temperaturas inferiores a 0 grados Celsius y que en teoría no debería existir porque a esa temperatura todo debería estar en estado sólido. Aunque hubiera cierta evidencia experimental, es de gran importancia su demostración ya que el propio Premio Nobel de Química, el mexicano Mario Molina, pensaba que jugaba un papel crucial en el proceso de descomposición de la capa de ozono.

Había observaciones experimentales que sugerían que en la superficie del hielo existía una pequeña capa líquida de un espesor ínfimo y que se mantenía así incluso a temperaturas por debajo de la temperatura de fusión del agua. Gracias a la simulación informática y a las mejoras en los modelos de agua así como a la persistencia de la estudiante de doctorado María Martín Conde, la exactitud de los datos ha permitido observar en la pantalla lo que a simple vista sería imposible. "Si bien quien ya estuvo sobre esta pista fue el Nobel Mario Molina, la corroboración es tremenda desde el punto de vista medio ambiental", destaca Vega de las Heras. Esta capa líquida también está presente en las partículas de hielo de las nubes polares estratosféricas situadas en los polos. En el hielo no pueden penetrar otras moléculas pero sí en esta capa líquida de la superficie que sirve de "vasija de reacción" cuando se disuelven sustancias nocivas que los humanos desprendemos a la atmósfera y que facilitan el proceso de destrucción de la capa de ozono.

Los hielos del futuro

El responsable del grupo de la Complutense dentro del proyecto MOSSNOHO es consciente de todo lo que queda por investigar y por hacer. Pero también sabe mirar más allá al comentar las posibles aportaciones que puede tener todo este trabajo para resolver problemas no tan lejanos y de primera magnitud como el desafío de los recursos energéticos. Carlos Vega no duda en resaltar la importancia de los hidratos de metano o la búsqueda de una solución para el almacenamiento de hidrógeno, como campos de gran interés para la Ciencia.

Como él mismo explica, hace 15 años se descubrió que hay una importante cantidad de metano en los fondos marinos, 10 veces más cantidad de este llamado gas natural del que hay en los pozos petrolíferos. Ese gas está en forma de hidrato de metano, un sólido en el que la pequeña molécula de metano se sitúa en los agujeros que deja la molécula de agua cuando forma el hielo. No se trata del hielo que conocemos sino de una variante algo diferente que se forma cuando la mezcla agua/ metano se encuentra a temperaturas que rozan los 0 grados y a presiones de unas 20 atmósferas. En el fondo del mar existen esas condiciones de presión y temperatura. No es de extrañar por tanto, la formación de esos hidratos de metano. Es necesario conocer qué propiedades tiene esos hidratos para luego pensar en cómo extraerlos para sacar energía. La carrera por liberar dicho gas natural acaba de comenzar. En los últimos 5 años el número de estudios de simulaciones por ordenador de hidratos de metano se ha disparado y ahí de nuevo es necesario el modelo de agua. En colaboración con el grupo de la profesora Amparo Galindo del Imperial College de Londres, hemos iniciado ya estudios mediante simulación de dichos hidratos de metano. Estamos en el lugar adecuado en el momento adecuado".

Otra vía de investigación especulativa pero muy interesante, pasaría por tratar de eliminar parte del CO₂ de la atmósfera capturándolo en forma de hidrato de dióxido de carbono. Todo un desafío cuando las alarmas por el calentamiento de la tierra están encendidas y la comunidad científica lo considera una realidad. Ese desafío pasaría por, una vez liberado ese metano para utilizarlo como forma de energía, los espacios que deja se utilizarían para que el CO₂ ocupase la posición que deja vacante el metano. En ese caso podríamos estar eliminando CO₂ de la atmósfera de una manera inerte y limpia ya que lo acompañaría al CO₂ es agua. De las Heras es consciente de que "hoy por hoy es una idea especulativa ya que el cómo hacerlo es todavía futuro".

La tercera vía o aplicación que resalta el profesor Vega, está en la posibilidad de almacenar hidrógeno en forma de hidratos de hidrógeno. Un grupo experimental holandés obtuvo hidratos de hidrógeno a presiones moderadas hace un par de años y publicó este importante estudio en la revista *Science*.

Quien lleva toda una vida dedicado al estudio del agua se muestra confiado en el buen camino por que el que están yendo las investigaciones y aunque es cauto a la hora de hablar de aplicaciones tangibles presenta una mirada confiada en los premios que la vida nos termina regalando cuando nos dedicamos a algo con ahínco, ilusión y método. Quizá por eso, en la fotografía que preside la mesa de trabajo de Carlos Vega de las Heras, detrás de él y sus hijos, se vea el fluir de un río de montaña.



El profesor Vega, en el despacho en que desarrolla sus investigaciones



Equipo informático para la simulación por ordenador

"La simulación ayuda a predecir y a entender los comportamientos que estudiamos aportando además una imagen del proceso estudiado"

"Los sistemas de computación han permitido multiplicar el volumen de procesamiento con la consiguiente rapidez en los cálculos y avance en los trabajos"

"Estamos poniendo a punto ya programas que nos van a permitir estudiar efectos cuánticos en el agua que aparecen cuando ésta se encuentra a muy baja temperatura. Entender dichos efectos es tremendamente importante sobre todo cuando uno se interesa por el agua interestelar"

"La próxima parada del autobús podría ser incorporar moléculas biológicas dentro de este esquema de la Termodinámica Estadística y la simulación por ordenador"

"El agua es la campeona en sólidos porque tiene 15 estructuras sólidas distintas"

Proyecto MOSSNOHO

CENTRO

Universidad Complutense de Madrid (UCM)

Líneas de Investigación

Simulación por ordenador de líquidos y sólidos mediante técnicas de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Termodinámica Estadística. Transiciones de fase en el agua

Personal

Investigador: Carlos Vega de las Heras

Datos de Contacto:

Dirección: Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Ciencias
Químicas Avd. Complutense s/n
28040 Madrid

Teléfono: 91 3944202

e-mail: cvega@quim.ucm.es

Web: <http://www.ucm.es/info/molecsim/index.html>