

UN CUBO DE RUBIK COMO TABLA PERIÓDICA MOLECULAR

En memoria de Ray Hefferlin

Autor: Martínez-Troya, D.¹

RESUMEN

En este artículo se describe de forma esquemática una forma de construir una tabla periódica para moléculas diatómicas a partir de un cubo de Rubik. A través de los clásicos movimientos que permiten desplazar las piezas del cubo, se pueden representar los valores de las frecuencias de vibración para cada pareja de elementos en posiciones yuxtapuestas, ya sean moléculas homoatómicas o heteroatómicas. El resultado carece de la capacidad de predicción de otros modelos mucho más apropiados, pero es muy atractivo como juego y como expansión de la Tabla Periódica tradicional.

Palabras clave: Cubo de Rubik; Tabla Periódica Molecular; Periodicidad molecular; Moléculas diatómicas.

ABSTRACT

In this paper I describe a schematic way of making a Periodic System of diatomic Molecules, based on a Rubik cube structure. We can represent the values of the vibration frequencies for each diatomic molecule in adjacent positions of the pieces, for homoatomic or heteroatomic pairs. The resulting cube has not the predicting ability of other models, more complexes and developed, but it's a very attractive as a toy-tool and as an expansion of the traditional Periodic Table of elements.

Key words: Rubik's Cube; Periodic System of diatomic Molecules; Molecular Periodicity; diatomic molecules.

INTRODUCCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

Hace ya bastantes años que tuve la suerte de conocer al profesor Ray Hefferlin, profesor de Física en la Southern Adventist University en Collegedale, Tennessee. El poco tiempo que pude compartir sus conocimientos, por culpa de su fallecimiento, primero gracias a charlas distendidas en mi ciudad de Olvera, al norte de Cádiz, y posteriormente leyendo sus artículos y capítulos de libros, me hizo apreciar su llamativa idea de conseguir una estructura que permitiese evidenciar y pronosticar la periodicidad de propiedades fisicoquímicas en moléculas diatómicas, como por ejemplo la frecuencia de vibración². Me invitó a imaginar algún método práctico, a pesar de que él ya había conseguido representaciones muy eficientes, solventando problemas serios como la

¹ Daniel Martínez Troya vaergael@gmail.com

² Hefferlin, R. (2006). "The Periodic Systems of Molecules". En Baird, D., Scerri, E., McIntyre, L. (Ed.), *Philosophy of Chemistry. Synthesis of a New Discipline*, (pp. 221-243). Dordrecht, Países Bajos: Springer.

consideración de una cuarta dimensión para moléculas ionizadas³, que permite pronosticar valores para moléculas diatómicas⁴ que todavía no han sido halladas en la naturaleza, particularmente en las atmósferas de exoplanetas⁵, un tema que apasionaba al profesor Hefferlin. Hay que tener en cuenta que su tesis doctoral trataba precisamente sobre la determinación de la fuerza del oscilador armónico en moléculas a partir de la espectroscopia óptica. De cualquier forma a la hora de representar la periodicidad de moléculas el recurso a las cuatro dimensiones ya había sido empleado por F. Kong⁶ dado que en opinión de R. Hefferlin la tabla de Kong puede considerarse una proyección bidimensional de una estructura de cuatro dimensiones⁷. Planteamientos como el de sendos autores han permitido explorar las relaciones entre moléculas pequeñas y proyectar generalidades físico-químicas de mayor o menor repercusión.

Las justificaciones de este artículo las copiaré directamente de las mismas que dio Ray Hefferlin en una de sus obras⁸:

There have been three reasons for wanting to create a periodic system of some or all molecules. The first, to organize vast numbers of species into some elegant form (yes, like stamp collecting). The second, to provide a graphic representation of trends among molecular properties for the educational enterprise (with the added hope that some of the trends may surprise the research establishment). The third, simply to satisfy curiosity. These three reasons are all in the spirit of "pure" science.

De las tres opciones, reconozco que a mí me bastó la tercera para ponerme manos a la obra, e incluso añadiría una cuarta, la simple excusa de pasarlo bien reconstruyendo sobre un cubo de Rubik toda una serie de relaciones intermoleculares, a modo de base de datos, como esos lápices de antaño que tenían las tablas de multiplicar sobre su superficie. El resultado final es tan curioso como innecesario.

Escribo este artículo, muy diferente a los que suelo escribir para nuestra revista Bórax, eminentemente práctica, sin otra pretensión que la de recordar con cariño a quien todavía a una edad avanzada seguía explicando con una pasmosa lucidez y estimulando la investigación en cualquier persona de la forma más desinteresada. Desde la Sierra Norte de Cádiz, va por ti Ray, porque en el fondo, la Ciencia no es más que otra excusa para disfrutar de las personas.

³ Hefferlin, R., Campbell, R., Gimbel, D., Kuhlman, H., Cayton, T. (1979). The periodic table of diatomic molecules—I an algorithm for retrieval and prediction of spectrophysical properties. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 21 (4), 315-336.

⁴ Burdick, G. W., Hefferlin, R. (2011). "Data Location in a Four-Dimensional Periodic System of Diatomic Molecules". En Putz, M. V. (Ed.) *Chemical Information and Computational Challenges in the 21st Century*, (pp. 197-212). Nueva York, EEUU: Nova Science Publishers.

⁵ Tennyson, J., Yurchenko, S. N. (2012). ExoMol: molecular line lists for exoplanet and other atmospheres. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425, 21-33.

⁶ Kong, F., Wu, W. (2012). Periodic tables of diatomic and triatomic molecules. *Science China Chemistry*, 55, 618-625.

⁷ Hefferlin, R. (2006). *Op.cit.* p.226.

⁸ Hefferlin, R. (2006). *Op.cit.* p. 223.

OBJETIVO

La idea que subyace en esta investigación no es otra que la de construir un modelo de Tabla Periódica para moléculas diatómicas, homoatómicas y heteroatómicas, tanto si han sido estudiadas como si son meras conjeturas propias de las combinaciones al azar de elementos de la tabla periódica. Las formas propuestas en la literatura para estas tablas diatómicas son muy útiles si se manejan a través de representaciones informáticas⁹ pero son escasamente prácticas si se pretenden armar en un mundo tridimensional.

La Tabla Periódica de moléculas diatómicas basada en una sucesión de cintas de Moebius, es preciosa pero ingobernable¹⁰, de hecho se puede ver una imagen de su autor sosteniéndola en la página que le ha dedicado su universidad¹¹ y puedo asegurar que la cinta es bastante compleja de manipular a la hora de comprobar relaciones y cruzar datos. La estructura en cinta de Moebius permite que desaparezcan las redundancias derivadas de considerar las uniones por combinación de los periodos¹², de modo que una molécula diatómica LiBe no se diferencie de una BeLi. Aquí a la derecha se pueden ver tres cintas de Moebius, imagen que R. Hefferlin me envió a modo de explicación de cómo podía componerse parte del conjunto de la tabla.



Tabla de moléculas diatómicas en forma de sucesión de cintas de Moebius. Fotografía tomada y compartida por R. Hefferlin

En mi opinión, este tipo de tablas que permiten cruzar un número alto de datos, no deben ser fijas cuando hay que construirlas en tres dimensiones. Mi idea fue precisamente colocar columnas de la tabla periódica sobre las caras de un cubo de Rubik, de manera que a partir de los movimientos del mismo se puedan reproducir todas las combinaciones necesarias una y otra vez, sin que en un tiempo determinado tengan que estar todas visibles. El eje temporal nos sirve entonces de aliado, aunque es cierto que esa artimaña resta visibilidad a las posibles relaciones periódicas que hubieran podido extraerse si la tabla hubiera tenido una estructura fija que obligue a situar

⁹ En el tema desarrollado por G.W. Burdick y R. Hefferlin (2011) se pueden visualizar muchas de las relaciones en diferentes planos de un hipercubo.

¹⁰ Hefferlin, R. (2007). A Moebius-Strip Representation of the Matrix-Product Periodic System of Diatomic Molecules. (A partir de una copia del artículo original facilitado por el autor).

¹¹ <https://www.southern.edu/academics/physics/faculty/rayhefferlin.html>.

¹² Hefferlin, R. A. (2009). Mapping Out PQ=QP Redundancies in NxN Data Arrays. International Journal of Chemical Modeling, 1 (3/4), pp. 415-420.

especialmente a aquellas moléculas con un comportamiento semejante respecto a una propiedad fisicoquímica, tal y como ocurre con las columnas de la tabla periódica convencional. En mi cubo, los planos de afinidad que aparecen en el hipercubo de Burdick y Hefferlin, se desintegran, por lo que la periodicidad se desvanece, perdiendo utilidad a pesar de ganar manejabilidad. Soy consciente de que la principal función de este tipo de construcciones, la de predecir y visibilizar relaciones no directamente perceptibles, se pierde, por lo que deja de tener sentido como herramienta. De cualquier forma, me divertí como pocas veces, diseñando una forma alternativa de representar las relaciones entre átomos y creando una tabla dinámica de moléculas diatómicas bastante interesante para cualquier químico entusiasta, como es mi caso.

DISEÑO DE LA TABLA

La tabla que propongo para moléculas diatómicas busca simplemente mostrar los datos de magnitudes fisicoquímicas que presentan una periodicidad constatable a nivel molecular, como ocurre particularmente con las variables espectroscópicas: longitud de enlace, frecuencias de vibración, energías de ionización, energías de atomización y otras parecidas. Esta periodicidad es rastreable incluso en moléculas que están en estado sólido y líquido, no solo en estado gaseoso, que es el estado de agregación para el que se suelen tomar las medidas de las variables sospechosas de tener una periodicidad¹³. En este sentido, podemos representar muchos de estos valores sobre el cubo, ya sean teóricos o experimentales.

En la tabla periódica de moléculas diatómicas de R. Hefferlin, con forma de cinta de Moebius, los valores representados son principalmente: la molécula diatómica correspondiente, el término espectral, la energía de disociación, la frecuencia de vibración y la distancia de enlace.

He ₂	...	0	(0.006)	(2.9)
LiF	(¹ Σ ⁺)	8	5.91	11.3	910.34	1.5638
BeO	(¹ Σ ⁺)	8	4.6	10.1	1487.3	1.3309
BN	(³ Π)	8	(4.03)	...	1514.6	(1.281)
C ₂	(¹ Σ ⁺ _g)	8	6.21	11.9	1854.7	1.425

Fragmento de la Tabla Periódica de moléculas diatómicas de R. Hefferlin.

La fotografía fue tomada por el propio Hefferlin, que la compartió conmigo para describir el resultado.

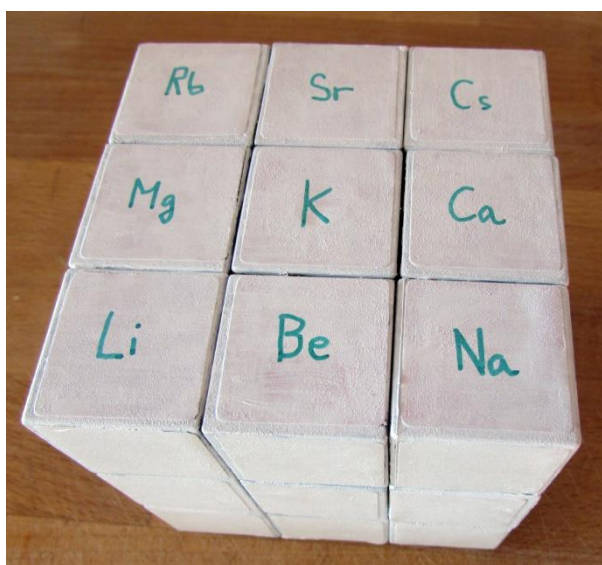
¹³ Babaev, E.V., Hefferlin, R. (1996). The Concepts of Periodicity and Hyper-Periodicity: from Atoms to Molecules. En Rouvray, D. (Ed.) Concepts in Chemistry: a Contemporary Challenge. Londres, Gran Bretaña: Research Studies Press, pp. 41-100.

Como paso a describir ahora, yo he comenzado representando relaciones Z_A, Z_B pero es muy apropiado para las frecuencias de vibración fundamentales ω_e en cm^{-1} , así como valores conocidos para el resto de esas mismas variables periódicas. Dichos datos se pueden tomar de cualquier tabla de datos disponible, aunque yo me limité a los valores de número atómico, hubiera podido usar los de la tabla de Hefferlin.

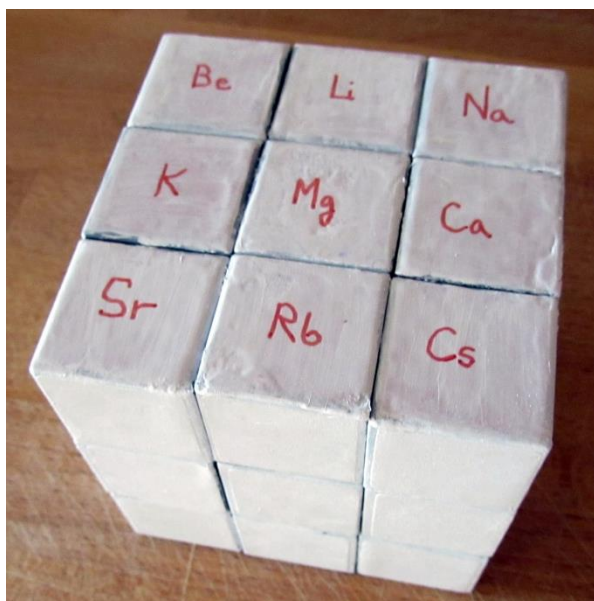
a) Preparación del cubo de Rubik para una tabla de 27 elementos diferentes

Para comenzar voy a restringir la tabla a 27 elementos y así emplear el típico cubo de Rubik con 54 piezas diferentes, lo que implica el uso de dos cuadraditos diferentes por cada elemento. Lo ideal hubiese sido utilizar un cubo de Rubik en blanco, pero como no tenía ninguno a mano, usé pintura para eliminar los colores y dejarlo todo de color blanco.

De entre los dos primeros grupos de la tabla periódica elegí nueve elementos metálicos y los escribí sin considerar un orden concreto. De entre los alcalinos tomé el Li, Na, K, Rb, Cs; y de entre los alcalinotérreos el Be, Mg, Ca y Sr. No hubo ninguna razón concreta para haber elegido estos elementos, hubiera podido incluir el hidrógeno y el bario en esta primera tanda, pero la restricción a nueve elementos diferentes por cada par de caras del cubo obliga a seleccionar de alguna manera.



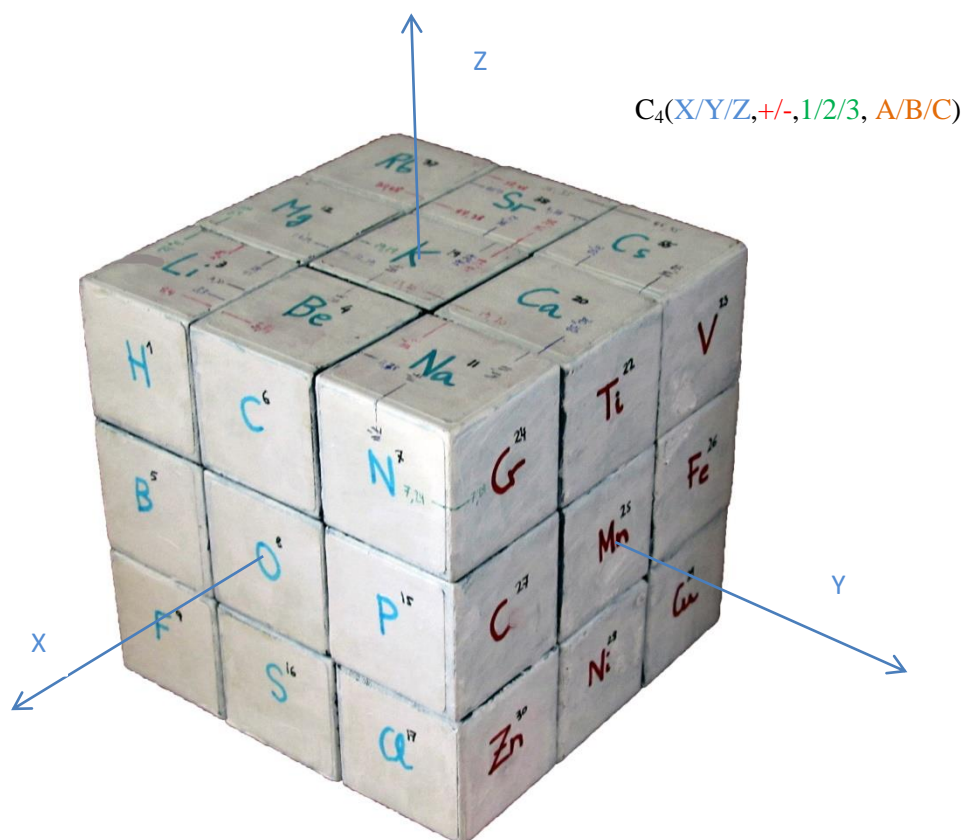
Usé un rotulador de color verde para los elementos de la cara superior y uno de color rojo para los elementos correspondientes de la cara inferior. La única condición indispensable en la distribución de los elementos es que el elemento central no sea el mismo en ambas caras. En este caso, en la cara superior es el K y en la inferior el Mg. La razón es que en el cubo de Rubik sendas piezas son inmóviles y sería imposible lograr la molécula diatómica homonuclear por rotaciones, en el caso de coincidir el mismo elemento en ambas caras.



Por ello intercambié las columnas primera y segunda de la cara superior (en verde) y las escribí invertidas sobre la cara inferior (en rojo), dejando la tercera columna en el mismo sitio, pero copiándola invertida.

b) Notación para las rotaciones

De una manera informal conviene establecer una notación para las rotaciones que van a llevar a unos elementos al lado de otros, formando sobre las caras las combinaciones relativas a las moléculas diatómicas. El código representaría rotaciones de cuaternario C_4 aplicadas según el eje, en sentido horario o antihorario y según la capa.



Según el código de rotación $C_4(X/Y/Z, +/-, 1/2/3, A/B/C)$ tenemos que C_4 representa una rotación de 45° , mientras que un valor de entre $X/Y/Z$ indica el eje respecto al cual se lleva a cabo el giro, siendo $+$ el movimiento antihorario y $-$ el horario conforme a la típica regla de la mano derecha. Por último, el valor elegido de $A/B/C$ indicaría la capa que rota de las tres posibles, siendo A la que está en contacto con el eje, es decir la más externa de las capas, siendo B la capa intermedia, y C la última de ellas. Según esta codificación un giro $C_4(X,-,2,C)$ con el cubo en la posición inicial marcada por la fotografía, representaría un giro de 180° en sentido horario de la tercera capa alrededor del eje X . Hubiera podido escribir C_2 y representar un binario en vez de un cuaternario, $C_2(X,-,1,C)$ pero por motivos de simplicidad tal vez sea mejor dejarlo todo en función a rotaciones cuaternarias.

c) Añado enlaces entre parejas y su número atómico a cada elemento

Una vez que he definido el sistema de rotaciones continuaré describiendo la construcción del cubo. Para ello escribí sobre cada elemento su número atómico, de manera que facilitase la suma y calcular de esta manera la masa de la molécula, dado que es un valor periódico. Además aproveché para trazar las líneas correspondientes a los enlaces entre los elementos de la misma cara, obviamente formando parejas heteroatómicas. Trazando esas líneas en un color y en una posición determinada permite escribir sobre ellas el valor de una magnitud periódica molecular, como es el caso de la frecuencia de vibración¹⁴. Esta línea representativa del enlace debe coincidir en las dos piezas de los elementos de la molécula y para leerse, en el caso de que se desconfigure el cubo, deben volver a hacerse coincidir en esa posición concreta.



Aquí se muestra la molécula diatómica Li—Be caracterizada por 3,4 (Z_{Li} , Z_{Be}) que tiene una frecuencia de vibración fundamental de $3,4 \text{ m}^{-1}$. Una cuestión básica que quizás, a pesar de resultar obvia, merezca reseñar consiste en que los valores de las frecuencias se corresponden realmente con los del número de onda, pero debido a la relación directa entre frecuencias y números de onda, se dan directamente así, en m^{-1} o

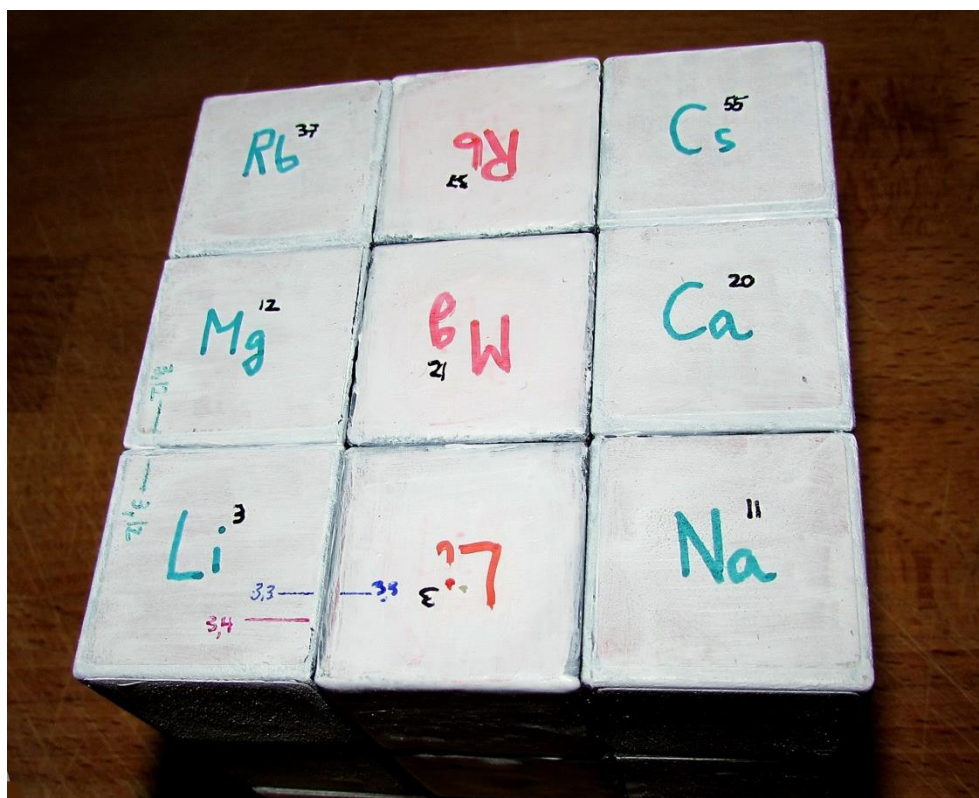
¹⁴ Yo no he usado las frecuencias de vibración, sino que he unido los valores de Z de ambos elementos por medio de una coma, pero hubiera podido escribir 314 cm^{-1} para la frecuencia de vibración de LiBe.

cm^{-1} y no en Hz. He usado diferentes colores para remarcar las dos moléculas diatómicas en las que participa el litio, pero bastaría con trazar las líneas de enlace a diferentes alturas, de manera que casaran solo con las adecuadas de la otra celda. No obstante, como los números que se encuentran a ambos lados de la línea de enlace deben ser coincidentes, la posibilidad de error es nula.

d) Elementos del Grupo A (correspondientes a las esquinas)

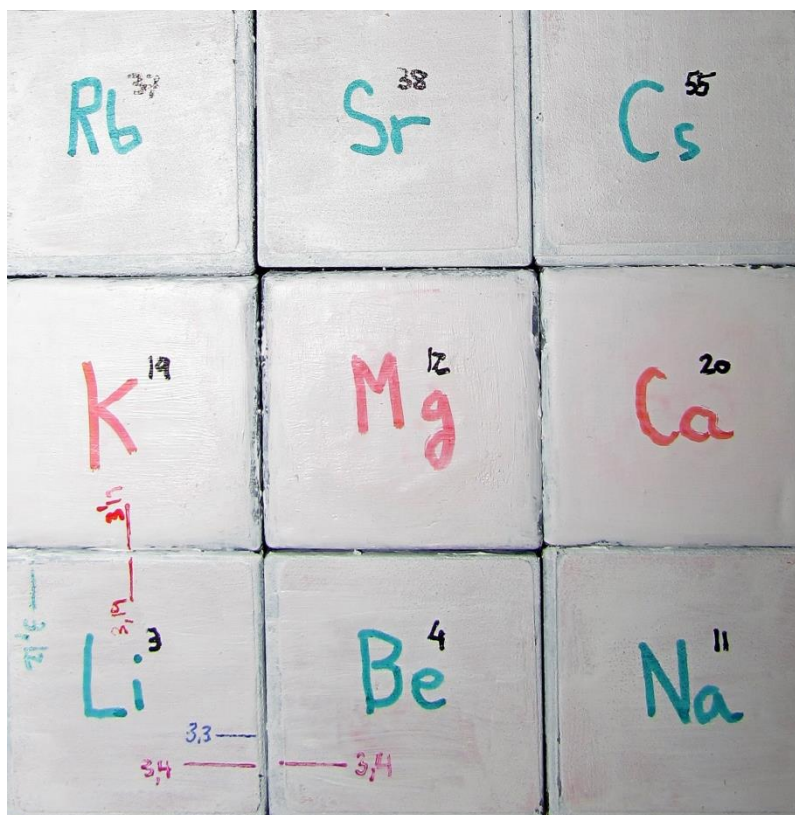
En nuestro cubo de Rubik aparecen el Li, Rb, Cs y Na en las esquinas. A estos elementos ligados por la simetría del cuadrado los englobaré en el Grupo A. A causa de esa simetría, todos los movimientos que realice con el Li serán igualmente válidos para los otros tres, de modo que usando al Li como representante del grupo validaré al resto. Teniendo en cuenta que en la cara inferior del cubo tenemos los mismos elementos, se trata de buscar todos los movimientos que permitan construir las moléculas diatómicas en las que participa el litio como representante de los elementos del Grupo A: Li—Li, Li—Be, Li—Na, Li—Mg, Li—K, Li—Ca, Li—Rb, Li—Sr y Li—Cs. Algunas de estas moléculas ya aparecen enlazadas en la cara de partida, como son los casos de Li—Be y Li—Mg, sin embargo el resto hay que construirlas a través de las rotaciones.

Con un simple giro C_4 (Y, +, 2, B) obtendré la molécula homoatómica del litio Li—Li y de una forma simétrica permitiría obtener las correspondientes parejas homonucleares para los elementos Rb, Cs y Na. La combinación de «número molecular» para el Li—Li sería de 3,3 como es lógico, representado a ambos lados de la línea azul del enlace. En su lugar hubiera sido mucho más instructivo poner la $\omega_{\text{Li-Li}}$.



C_4 (Y, +, 2, B)

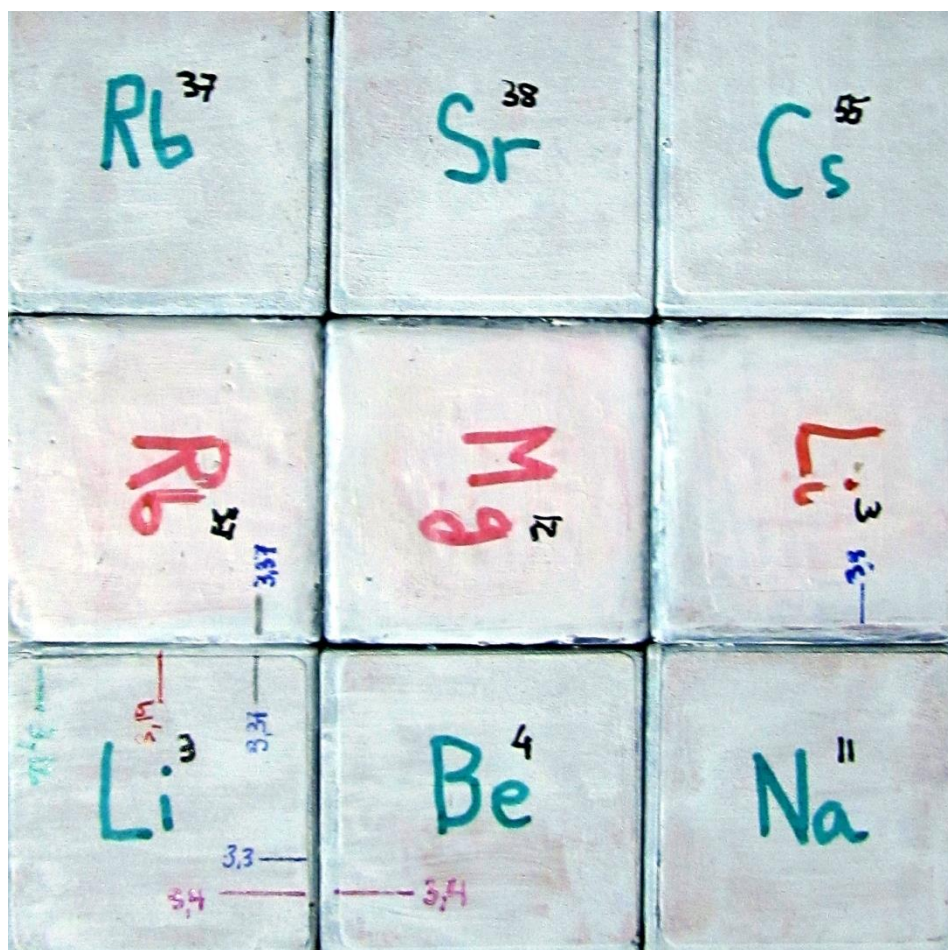
De forma análoga obtenemos la molécula Li—K, por medio de una rotación con notación $C_4(X, +, 2, B)$ que simultáneamente da Rb—K y de forma parecida facilita las uniones Cs—K y Na—K:



$C_4(X, +, 2, B)$

Para simplificar el procedimiento se podrían incluso trazar enlaces en diagonal, por ejemplo Li—Mg en la cara de arriba, sin embargo no es necesario, dado que por las rotaciones tradicionales del cubo de Rubik se obtienen todas las combinaciones. Las posibilidades que presenta una tabla periódica dinámica basada en movimientos, líneas de colores trazadas a diferentes alturas e incluso con líneas diagonales, son muy interesantes desde el punto de vista lúdico, no tanto como una herramienta de consulta ni como algo verdaderamente útil. Pero insisto en su plasticidad y su belleza intrínseca a la hora de combinar los átomos. Por otro lado, la posibilidad de colocar los enlaces a diferentes alturas, como si se incluyera un eje de energías donde localizar las frecuencias de vibración, de modo que cada altura diferenciada sirviese para comparar entre sí las fuerzas de los osciladores, representa otro añadido de interés que yo no he aprovechado en mi modelo. Como se ve, sobre esta base tan simple se pueden introducir muchas opciones atractivas.

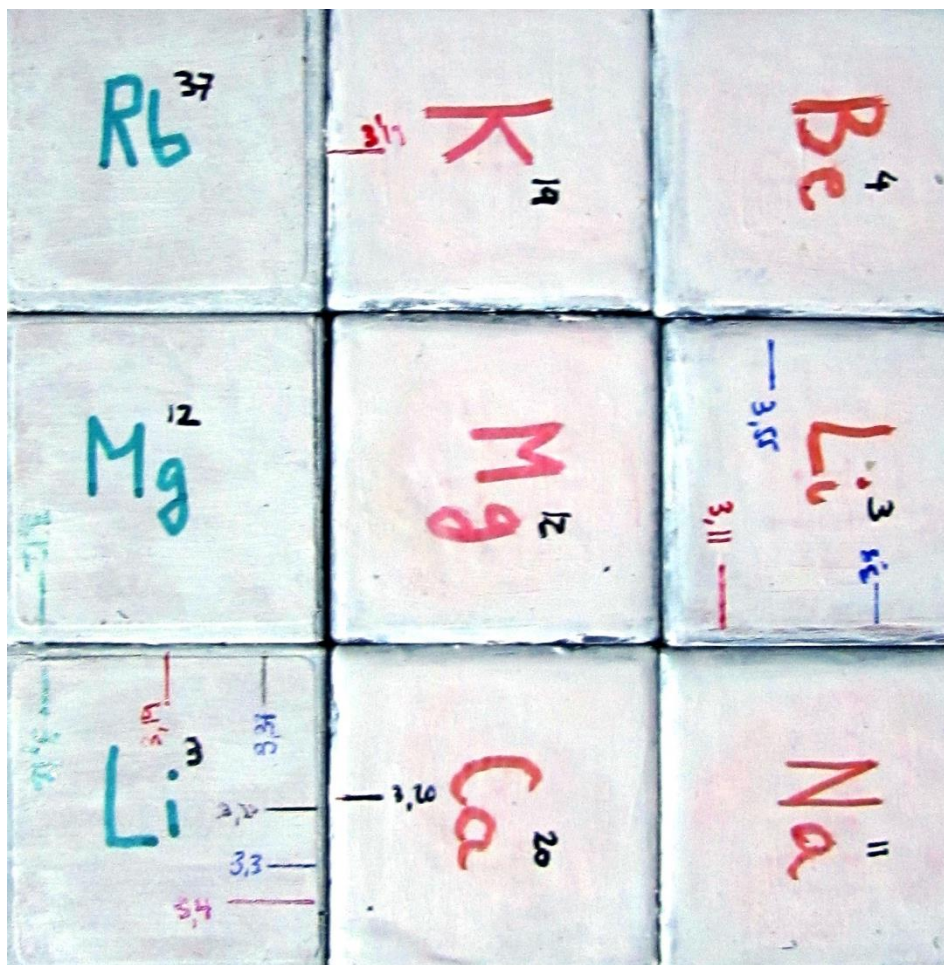
Las moléculas que quedan Li—Rb, Li—Ca, Li—Sr y Li—Cs se logran por medio de movimientos sucesivos. Para la molécula de Li—Rb se pueden hacer dos rotaciones $C_4(Z, -, 1, A) \cdot C_4(Y, -, 2, B)$:



Las cifras a ambos lados del trazo representativo del Li—Rb se corresponden con $Z_{Li}-Z_{Rb}$ (3,37) por lo que son irrelevantes, pero como ya he indicado se podrían sustituir por el valor de una magnitud espectral que se asume periódica, como la ω_{Li-Rb} .

Para conseguir las moléculas diatómicas Li—Cs y Li—Na se ejecuta una única rotación $C_4(X, +, 2, B)$, mientras que para la molécula Li—Ca se puede llevar a cabo una doble rotación $C_4(Z, -, 1, C) \cdot C_4(Y, +, 2, C)$. En la página siguiente se puede ver la imagen con el efecto de esta rotación aunque a causa de la poca calidad del cubo de Rubik de partida, la línea trazada entre el Li y el Ca se ha movido un poco, dando la sensación de que no encajan perfectamente. La realidad es que el color es el mismo y que ambos trazos a regla coinciden, a pesar de que se hayan deslizado un poco las dos capas del cubo.

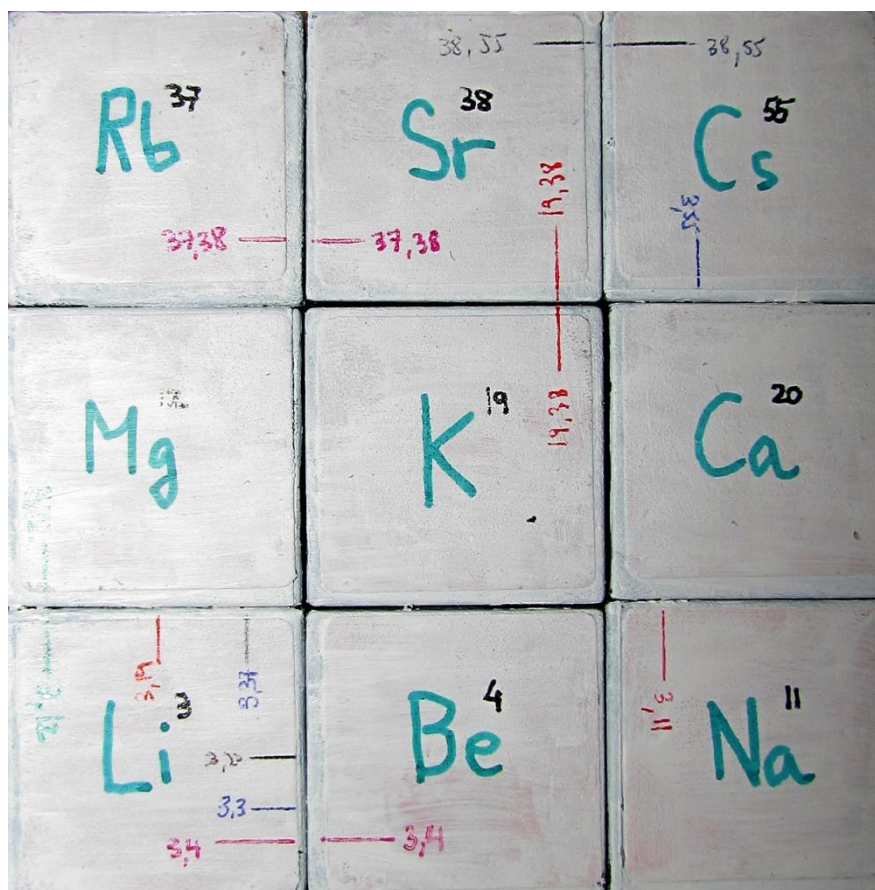
Por último, para obtener la molécula Li—Sr, se lleva a cabo una nueva combinación de rotaciones $C_4(Z, +, 1, A) \cdot C_4(Y, -, 2, B)$, que exploraremos más adelante para las alternativas de las moléculas en las que participa el Sr como átomo representativo del Grupo B y que engloba a los elementos en posiciones medias. Esa es la razón por la que no incluyo aquí la imagen de este movimiento y que después se podrá encontrar junto con las moléculas Sr—Mg, Sr—Ca y Sr—Na.



e) Elementos del Grupo B

Los elementos que he englobado en este grupo son aquellos que ocupan la posición intermedia de cada arista, es decir el Sr, Mg, Ca y Be en la cara superior del cubo de partida. De la misma forma que hice con el Li, las rotaciones necesarias para obtener las moléculas en las que participa el Sr pueden servir como prototipo de las otras tres por simetría. Hubiera podido hacer otro tanto con el Mg, con el Ca o el Be y usarlos como modelo para reconstruir los movimientos.

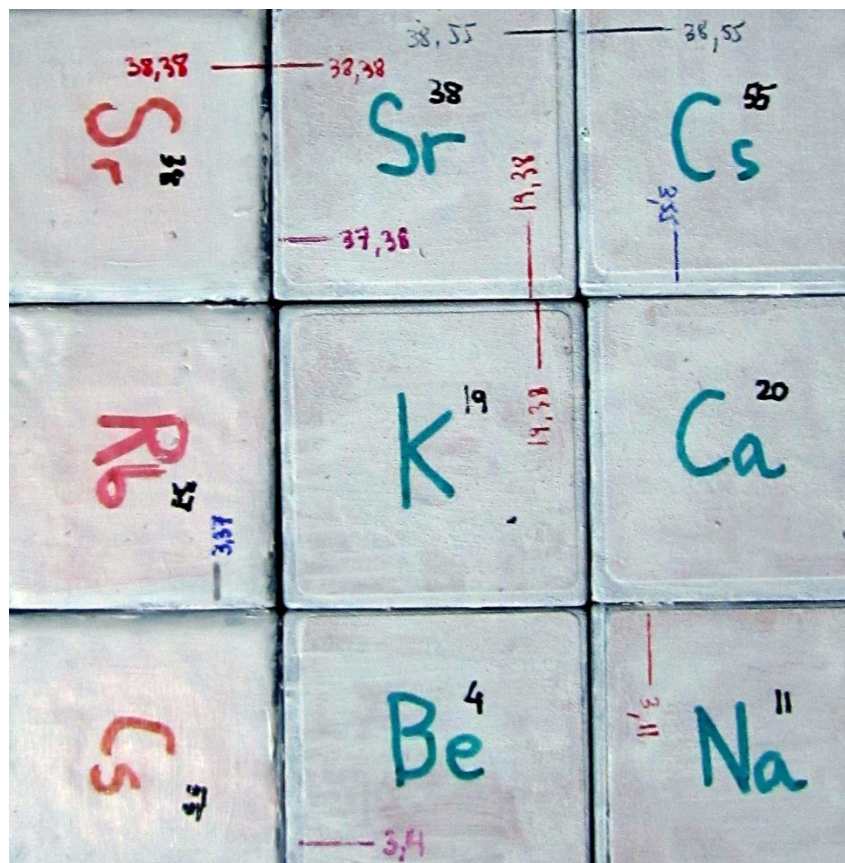
Hay que tener en cuenta que Li—Sr ya se ha señalado en el apartado anterior, por lo que solo tenemos que conseguir las moléculas Sr—Be, Sr—Na, Sr—Mg, Sr—K, Sr—Ca, Sr—Rb, Sr—Sr and Sr—Cs. En la posición de partida del cubo vemos que el estroncio se empareja directamente con el cesio, con el rubidio y con el potasio, de modo que tenemos las moléculas Sr—Rb, Sr—K y Sr—Cs desde el principio. En la imagen siguiente he marcado con regla estas uniones, incluyendo la notación Z_A-Z_B a ambos lados de la línea que representa el enlace, donde en una tabla definitiva se hubieran colocado las magnitudes espectroscópicas deseadas.



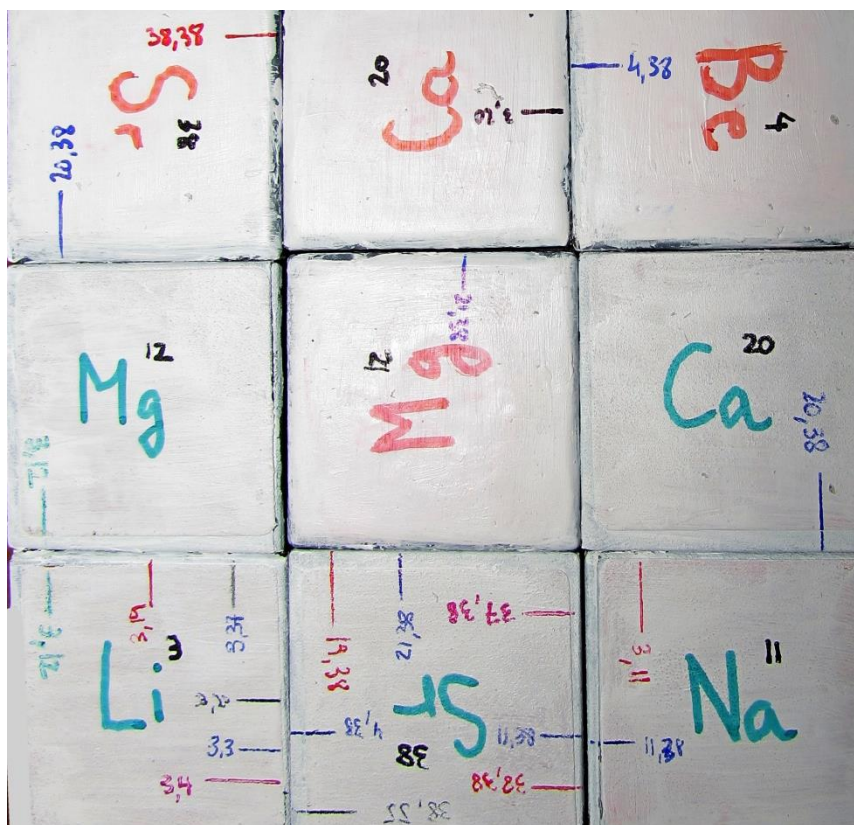
Cubo en posición de partida

Mientras que la molécula Sr—Sr se obtiene por la rotación C_4 (Y, +, 2, C), la molécula Sr—Be requiere una rotación idéntica pero en sentido contrario C_4 (Y, -, 2, C) a la que me volveré a referir cuando comente el movimiento necesario para obtener la molécula K—K. Como es comprensible, muchos de los movimientos que estoy representando aquí son simples alternativas para evidenciar que podemos construir todas las moléculas por medio de rotaciones, pero las estrategias son muchas y las formas en las que las casillas pueden yuxtaponerse son igualmente variadas, lo que supone a la vez una ventaja (por las alternativas que ofrece) como una desventaja (por la dificultad a la hora de alinear los segmentos). En la primera de las dos imágenes siguientes podemos ver el resultado de la rotación anterior C_4 (Y, +, 2, C), que permite formar la molécula Sr_2 y ofrece una nueva posibilidad para Sr—Rb, en línea con lo que acabo de advertir.

Las variantes Sr—Mg, Sr—Ca y Sr—Na en cambio se obtienen a partir de una doble rotación C_4 (Z, +, 1, A) · C_4 (Y, -, 2, B) mientras que la molécula Sr—Be requiere una combinación diferente C_4 (Z, -, 1, C) · C_4 (Y, -, 2, A) o alternativamente C_4 (Y, -, 2, C) como veremos más adelante al obtener K—K. En la segunda de las imágenes podemos ver el resultado de la doble rotación necesaria para formar las moléculas que faltan de Sr—Mg, Sr—Ca y Sr—Na.



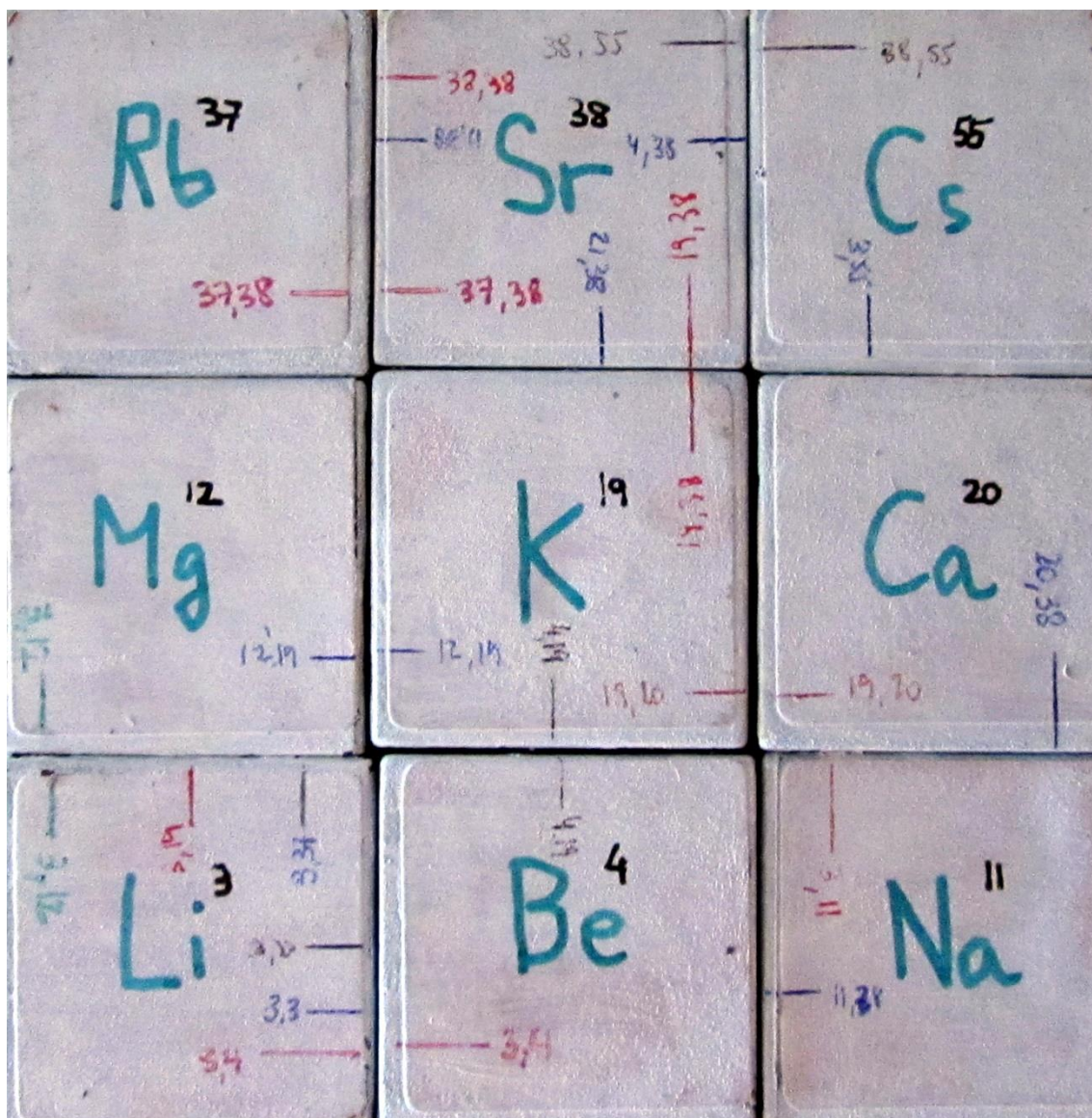
$C_4(Y, +, 2, C)$



$C_4(Z, +, 1, A) \cdot C_4(Y, -, 2, B)$

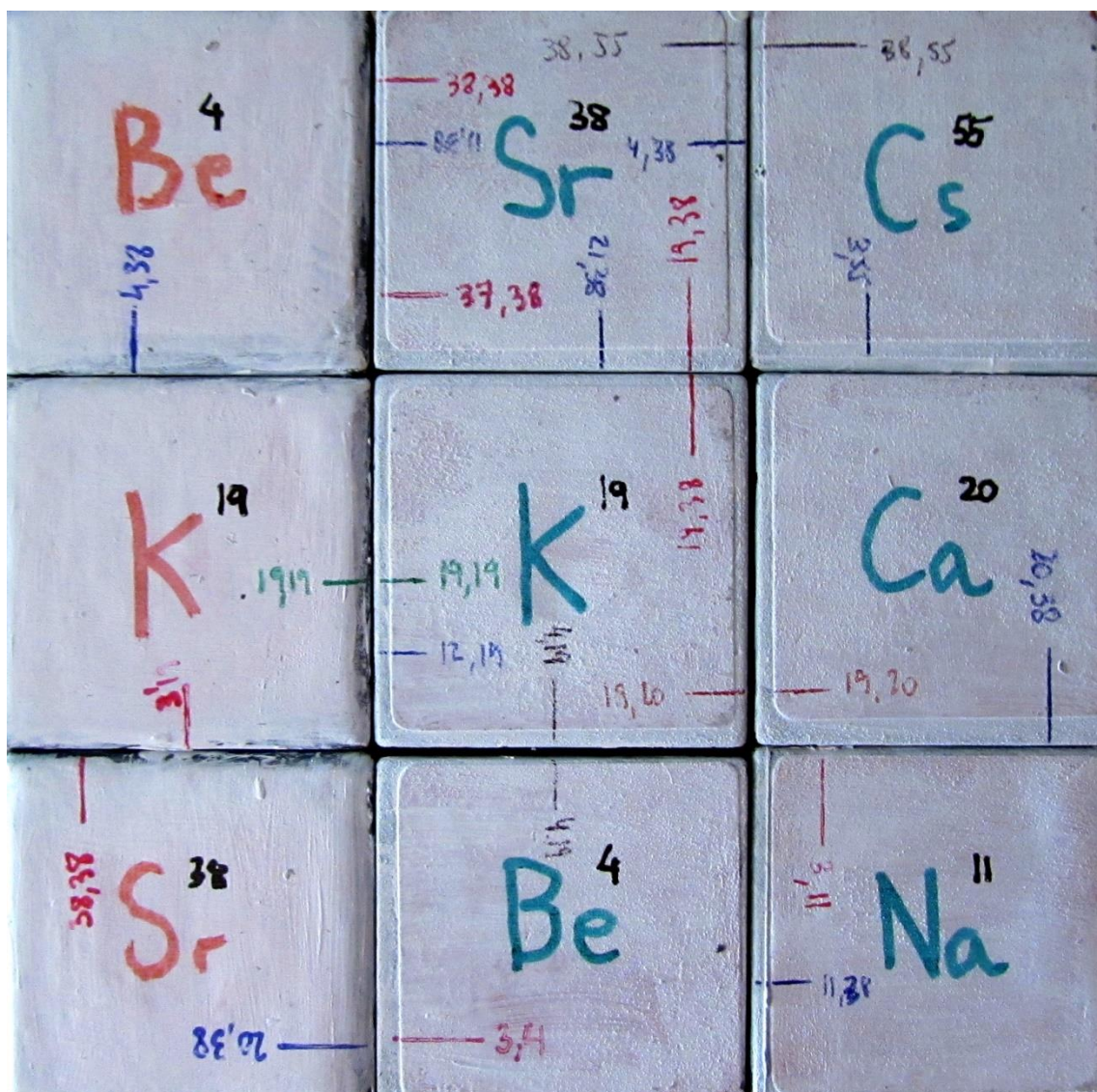
f) El elemento central

Muchas de las moléculas diatómicas en las que participa el elemento central ya se han obtenido, como es obvio. De entre todas las moléculas posibles en las que participa el potasio: K—Li, K—Be, K—Na, K—Mg, K—K, K—Ca, K—Rb, K—Sr y K—Cs, cuatro de ellas están ya presentes en la posición inicial del cubo. En la imagen se ve que K—Mg, K—Be, K—Ca y K—Sr aparecen directamente.



Posición inicial del cubo

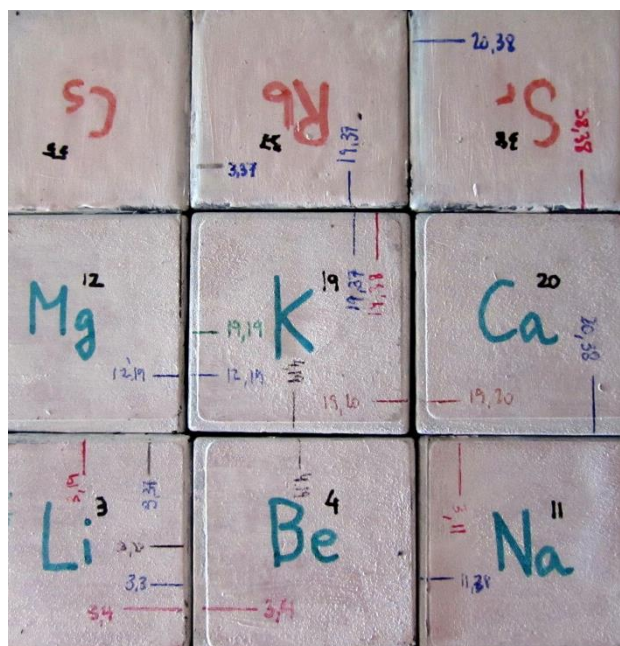
Si tenemos en cuenta que además de estas cuatro moléculas, ya se ha obtenido previamente Li—K, quedan por conseguir otras cuatro por medio de rotaciones. La molécula homoatómica K_2 se obtiene a través de una rotación simple $C_4(Y,-,2,C)$ como puede verse en la siguiente imagen, que ofrece nuevas posibilidades para algunas de las moléculas cuyos enlaces ya hemos trazado en otras posiciones de las piezas, como son los casos del Sr—Be y del Sr—K que aparecen por duplicado en la misma cara del cubo.



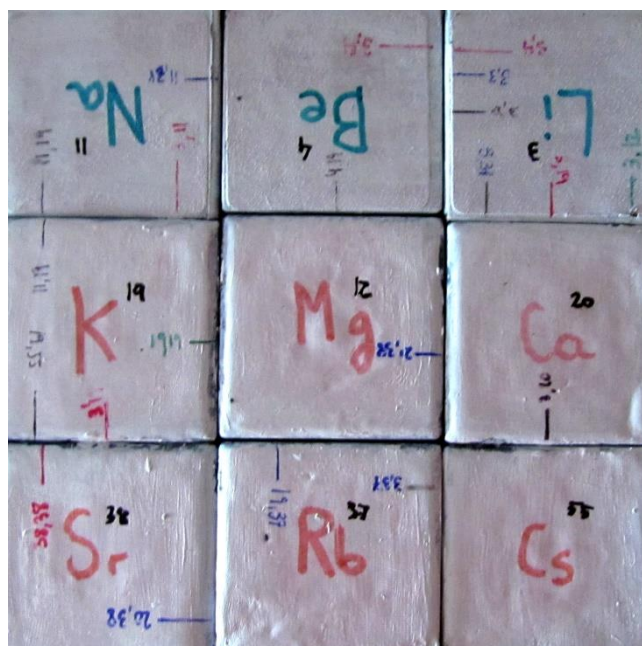
$C_4(Y,-,2,C)$

Para obtener las moléculas diatómicas K—Rb y K—Cs basta con hacer una rotación $C_4(X,+,2,C)$ de manera que aparezcan ambas simultáneamente, K—Rb sobre la cara superior del cubo y K—Cs en la cara inferior, mientras que para lograr la última de las combinaciones, es decir, K—Na, se requiere una rotación $C_4(X,+,2,A)$. El resultado de ambas rotaciones se puede ver en la página siguiente.

A estas alturas debe de haber quedado claro que mis descripciones a la hora de asignar rotaciones no son más que ejemplos accesibles para conseguir tener la molécula de forma rápida y no un intento de sistematizar todos los movimientos que podrían generar de forma exhaustiva una molécula concreta. De hecho, parte del encanto de este modelo consiste en tener el cubo completamente desordenado, y buscar las parejas de una forma asistemática, moviendo las partes de forma intuitiva hasta hacer coincidir los segmentos representativos de la pareja buscada. En el fondo el espíritu del diseño es más lúdico que científico.

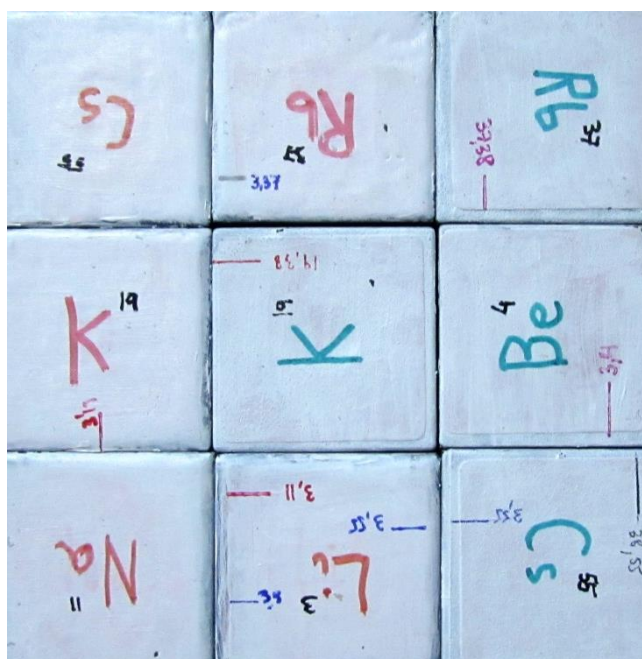


$C_4(X,+2,C)$ Cara Superior



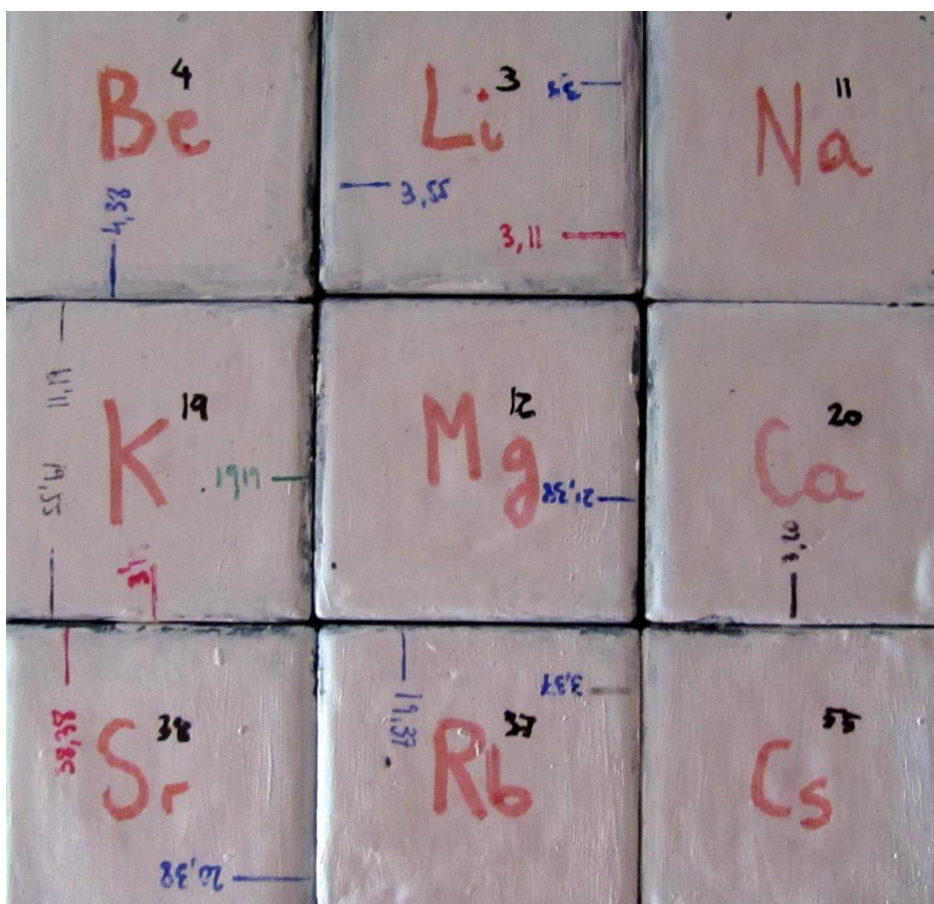
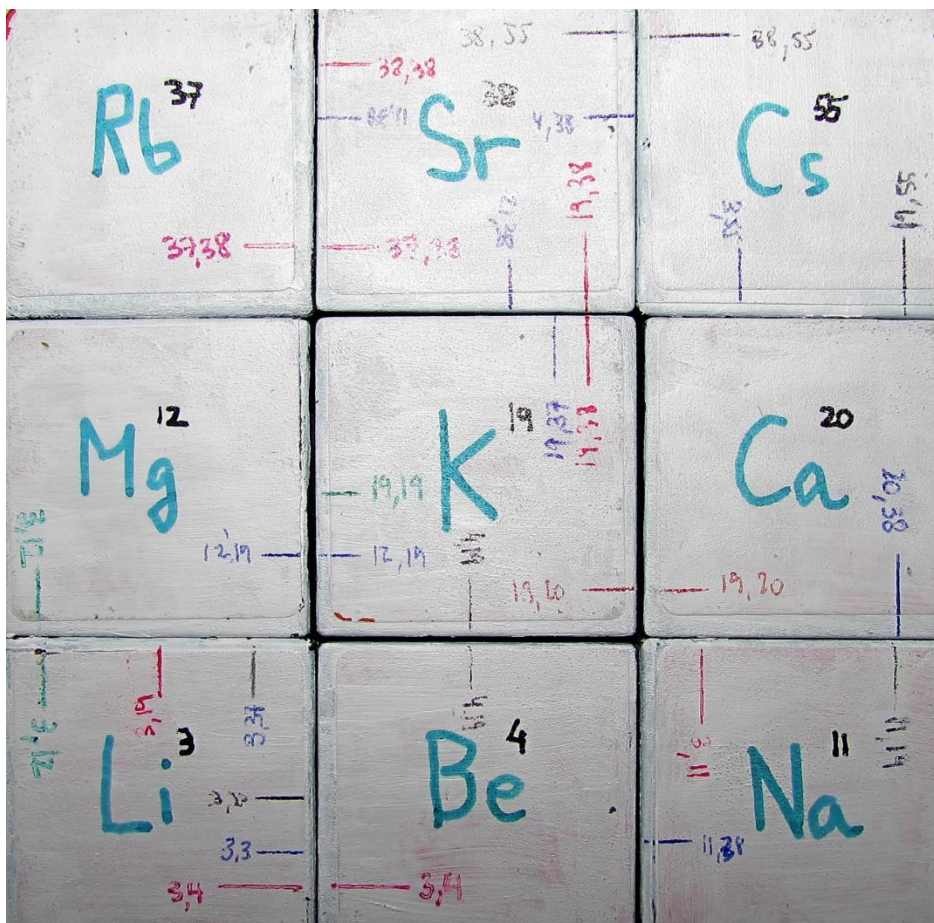
$C_4(X,+2,A)$

En esta imagen a la derecha se puede ver la posibilidad de unir el potasio con el cesio. Al principio creí que se trataba de la fotografía que realicé para ejemplificar el movimiento $C_4(X,+2,C)$ en su Cara Inferior, donde tengo anotado que aparecía la molécula K—Cs, sin embargo no puede tratarse de la cara inferior del cubo en ese movimiento, ya que si se observa, el Cs de la parte superior izquierda de ambas fotos es de color rojo. Así el Cs de esta imagen de la derecha es el mismo que el de la imagen de arriba, por lo que no puede ser la foto de la Cara Inferior. En el fondo no es ningún problema, dado que lo que pretendo es corroborar que todas las conexiones son posibles.



Enlace entre el K y el Cs

Una vez que se ha comprobado que todas las moléculas, tanto homoatómicas como heteroatómicas se pueden construir a través de las tradicionales rotaciones del cubo de Rubik, se puede ampliar la tabla añadiendo 18 elementos más, 9 por cada pareja de las cuatro caras que aún no he utilizado. Si vemos cómo queda el cubo sin hacer todavía esta expansión, comprobamos que tanto la cara superior (verde) como la inferior (roja) presentan ya todo un conjunto de segmentos, algunos unidos y describiendo el enlace, otros separados por las rotaciones.



g) Expansión a las caras restantes con otros elementos

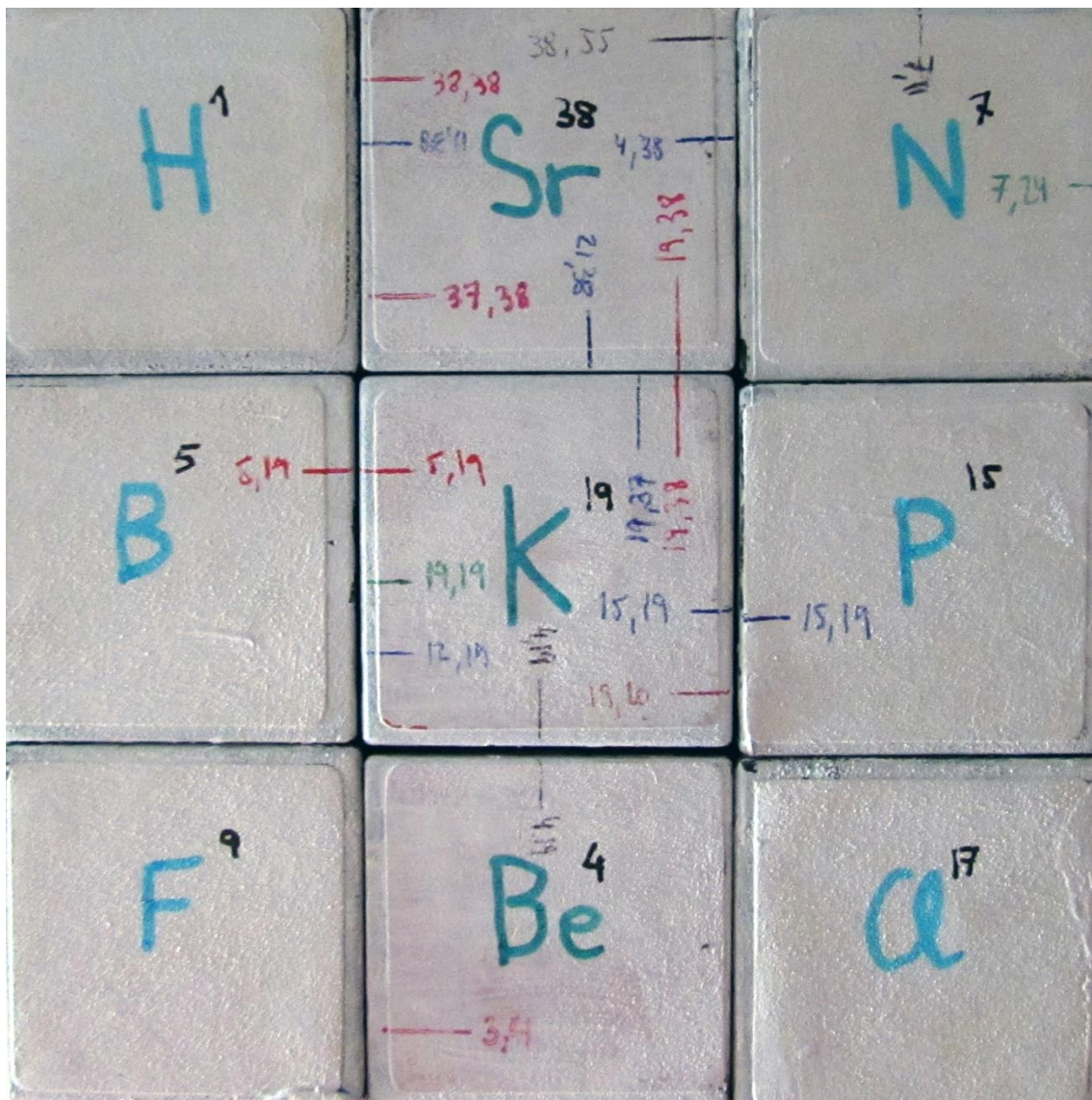
Las otras cuatro caras del cubo pueden completarse usando elementos de los grupos principales así como elementos de los metales de transición. Debido a la limitación de las piezas del cubo no cabrán más de 18 nuevos elementos, pero como ejemplo del potencial del cubo son más que suficientes. De esta manera he elegido los elementos H, C, N, B, O, P, F, S y Cl para una de las parejas de caras, y Cr, Ti, V, Co, Mn, Fe, Zn, Ni y Cu para la otra. Repitiendo los patrones sobre las caras opuestas y desplazando las columnas del medio, para que el elemento central no sea el mismo en cada pareja de caras, tenemos una construcción perfectamente simétrica a la que hemos analizado, de forma que todas las combinaciones son accesibles por medio de las rotaciones del cubo de Rubik.

Los elementos de esta tabla dinámica de moléculas pueden ser elegidos según los intereses particulares del diseñador, de forma que se adapten a las necesidades particulares del mismo.



A la hora de integrar los elementos de las caras de Alcalinos y Alcalinotérreos con las de los Metales de Transición o de los Grupos Principales, podemos aprovechar que hay celdas que están obligatoriamente unidas y que permanecerán fijas con independencia del tipo de rotación. Un ejemplo de ello son las piezas de los vértices, como el cubito en cuyas caras se representan el Na, el N y el Cr, cuyos trazos de enlace se pueden dibujar a través de la arista, permaneciendo fijos en todo momento. De la misma manera que sucede con las dos caras que conforman la parte media de la arista, donde por ejemplo el P y el Co siempre se mantendrán inevitablemente juntos.

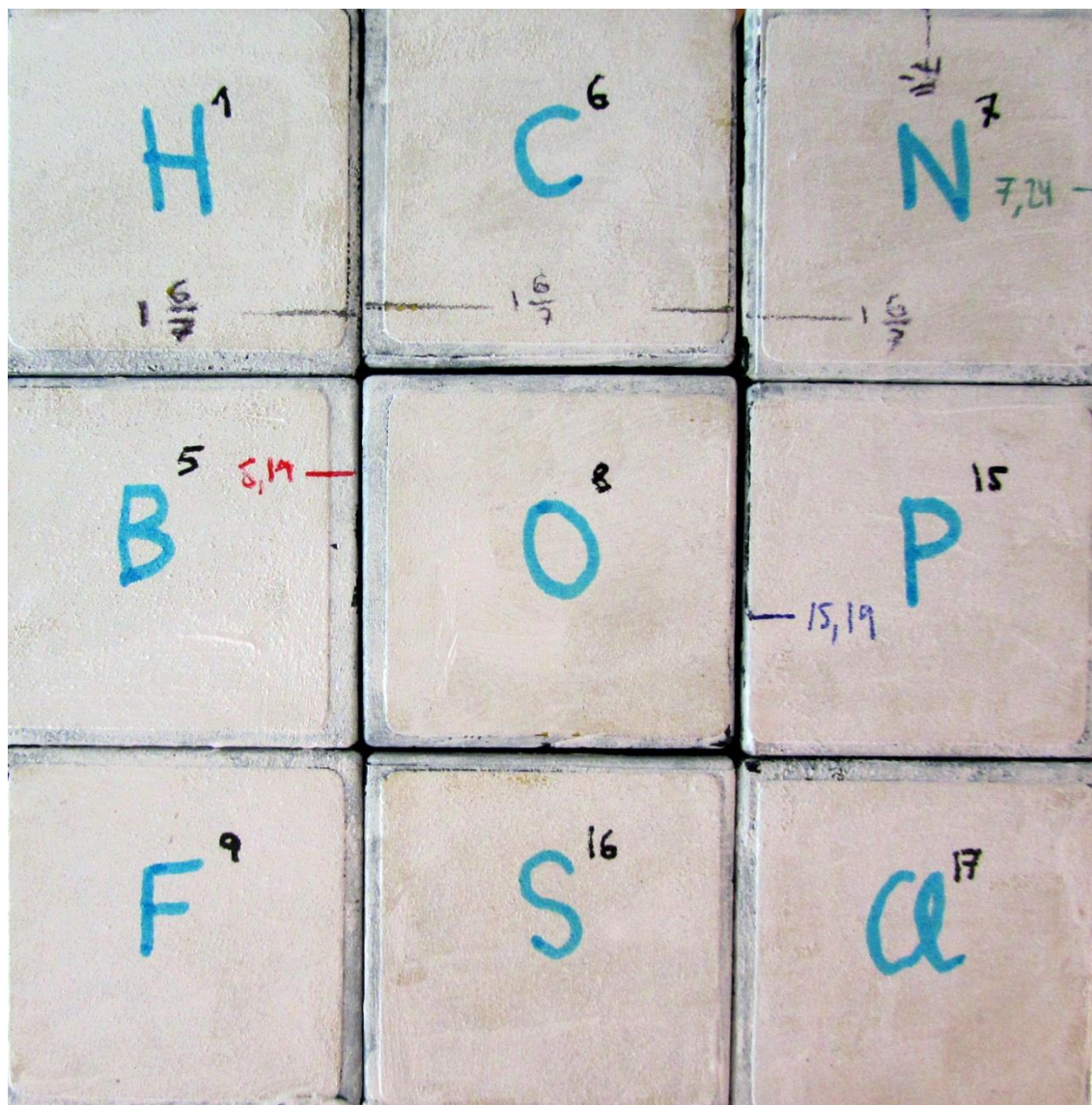
En estas condiciones, con todas las caras del cubo llenas de elementos, cualquier rotación establece nuevas relaciones entre elementos, con los que poder construir las moléculas diatómicas. Así la rotación $C_4(Y, +, 1, B)$ a partir de la posición inicial del cubo facilita, por ejemplo, la conexión del K con el P y el B:



$C_4(Y, +, 1, B)$

h) Con moléculas triatómicas

Este cubo base podría reinterpretarse para plasmar moléculas triatómicas. Aunque no es el objetivo de este artículo, la posibilidad de conseguir un modelo que se pudiera implementar para moléculas más complejas, siempre estuvo en las escasas conversaciones que mantuve con el profesor Hefferlin. En este caso, incluir moléculas triatómicas es muy sencillo, aunque habría que limitar a 18 los elementos de la tabla, al menos empleando cubos de Rubik del formato tradicional. La limitación se establece a causa de las moléculas homoatómicas, del tipo Li_3 , que podrían mostrarse alineadas según la combinación Li—Li—Li o formando un ángulo recto, sin que el dibujo con el que se presenta tenga ninguna relación con la geometría real de la molécula o del clúster correspondiente. Un ejemplo de ello es la molécula HCN , el ácido cianhídrico, cuya geometría coincide con la representada H—C—N , haciendo caso omiso a la multiplicidad del enlace C—N . La notación utilizada para identificar la molécula triatómica es la de un número compuesto $Z_A \cdot Z_B / Z_C$ pero, al igual que antes, hubiera sido más útil emplear una magnitud espectroscópica.



Esta posibilidad de representar una magnitud espectroscópica, como puede ser la frecuencia de vibración de los enlaces, tiene el interés añadido de ver cómo varía dicha magnitud cuando cada enlace pertenece a una molécula diatómica respecto a su valor cuando los enlaces se integran en una triatómica. No tiene la misma ω un enlace C—N correspondiente a una molécula CN, que ese mismo enlace C—N en HCN. De cualquier forma la representación de moléculas triatómicas exigiría utilizar también las diagonales de cada cara del cubo y otros tipos de conexiones entre los elementos representados en las celdillas, que permitirían ampliar aún más el número de átomos representados por molécula.

CONCLUSIONES

La periodicidad de algunas de las magnitudes características de los elementos de la tabla periódica se entrevé en algunas magnitudes propias de las moléculas diatómicas, particularmente en las espectroscópicas, como pueden ser la frecuencia fundamental de vibración (e igualmente para estados excitados), el potencial de ionización o la energía de disociación. La representación gráfica de estas periodicidades es particularmente compleja por cuanto requiere en uso de más de tres dimensiones, de ahí los esfuerzos de Hefferlin y otros científicos para representar planos concretos de menores dimensiones que nos permitan visualizar determinadas tendencias e incluso predecir valores y comportamientos en moléculas que aún no hayan sido identificadas.

Mi propuesta para usar las caras opuestas de un cubo de Rubik para obtener mediante movimientos las diferentes moléculas e indexar a través de un segmento tanto el enlace como los valores de las magnitudes trata de eliminar una de las dimensiones aprovechando el eje de tiempo durante el que se producen las rotaciones en el cubo. Sé que no es una solución real al problema y me percaté de que la idea está más cerca de quien pasa diferentes páginas de un libro, con las diferentes combinaciones de las caras del cubo que de una construcción estable que respete e identifique periodicidades que pudieran haber pasado inadvertidas al encontrar los datos en la una tabulada. Sin embargo considero que el resultado es atractivo, si no como herramienta, al menos como juguete excéntrico.

Este cubo de Rubik 3x3 permite representar e integrar en moléculas diatómicas hasta 27 elementos diferentes, lo que deja fuera a la mayor parte de la tabla periódica de elementos, pero existen cubos de mayor orden, como el cubo 7x7 que permitiría incluir 147 elementos, más de los que contiene la propia tabla periódica. En un mundo de ordenadores, móviles, aplicaciones y todo tipo de programas, una tabla física de moléculas diatómicas está fuera de toda razón, pero no por ello deja de tener un encanto particular que me hizo disfrutar enormemente mientras confeccionaba el prototipo.

Extender la aplicación de las moléculas diatómicas a estructuras más complejas, ya sean moléculas triatómicas o poliatómicas, es tan fácil como poco recomendable, salvo como pasatiempo lúdico. La complejidad de las combinaciones se dispara, pero el resultado continúa siendo pintoresco y ciertamente satisfactorio, desde el punto de vista del químico que curiosear, haciendo girar las partes del cubo de forma aleatoria,

encontrando tras cada giro toda una serie de datos sobrevenidos que se encuentran impresos con la precisión de la tecnología actual, a pleno color, sobre las celdas de las caras del cubo. Estoy seguro de que yo acabaría comprando una de estas tablas periódicas tridimensionales, aunque solo fuese para dejarla sobre la repisa y manipularla de tarde en tarde, en los intervalos de tiempo muerto entre lecturas, resolución de problemas y estudio. Con el tiempo, mi Tabla Periódica de moléculas diatómicas se habría acabado convirtiendo en un análogo para científicos de uno de esos objetos elásticos y gomosos que venden en las tiendas como pasatiempo para afrontar el estrés a base de apretar y distender los dedos de la mano repetidamente. Para muchos de nosotros, encontrar al azar dos o tres moléculas diatómicas tras cada giro del cubo a partir de un puñado de elementos, tiene el mismo efecto gratificante. Las cosas a las que lleva el hastío y un rechazo patológico al uso pasivo y absorbente del móvil. Espero que al menos Ray Hefferlin sonría al leer este artículo, a caballo entre lo serio y lo burlón, inspirado por alguna que otra charla en el incomparable marco de la vieja Olvera.

BIBLIOGRAFÍA

- Babaev, E.V., Hefferlin, R. (1996). The Concepts of Periodicity and Hyper-Periodicity: from Atoms to Molecules. En Rouvray, D. (Ed.) Concepts in Chemistry: a Contemporary Challenge. Londres, Gran Bretaña: Research Studies Press, pp. 41-100.
- Burdick, G. W., Hefferlin, R. (2011). “Data Location in a Four-Dimensional Periodic System of Diatomic Molecules”. En Putz, M. V. (Ed.) Chemical Information and Computational Challenges in the 21st Century, (pp. 197-212). Nueva York, EEUU: Nova Science Publishers.
- Hefferlin, R. (2006). “The Periodic Systems of Molecules”. En Baird, D., Scerri, E., McIntyre, L. (Ed.), *Philosophy of Chemistry. Synthesis of a New Discipline*, (pp. 221-243). Dordrecht, Países Bajos: Springer.
- Hefferlin, R. (2007). A Moebius-Strip Representation of the Matrix-Product Periodic System of Diatomic Molecules.
- Hefferlin, R. A. (2009). Mapping Out PQ=QP Redundancies in NxN Data Arrays. *International Journal of Chemical Modeling*, 1 (3/4), pp. 415-420.
- Hefferlin, R., Campbell, R., Gimbel, D., Kuhlman, H., Cayton, T. (1979). The periodic table of diatomic molecules—I an algorithm for retrieval and prediction of spectrophysical properties. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 21 (4), 315-336.
- Kong, F., Wu, W. (2012). Periodic tables of diatomic and triatomic molecules. *Science China Chemistry*, 55, 618-625.

- Tennyson, J., Yurchenko, S. N. (2012). ExoMol: molecular line lists for exoplanet and other atmospheres. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 425, 21-33.