

**El agua puede permanecer en estado líquido hasta los -48,33 ºC**

El agua pura en estado líquido puede empezar a congelarse a temperaturas muy inferiores a 0 ºC, tras un cambio estructural previo en el que algunas moléculas se organizan en tetraedros. Estas estructuras, de localización aleatoria, determinan el ritmo de la formación de hielo a temperaturas de hasta -48,33 ºC, según un estudio que esta semana publica *Nature*.



La caja está llena de agua líquida (blanco). El líquido súper enfriado empieza a convertirse en ‘hielo intermedio’ (verde), de camino a la congelación (rojo), en una temperatura muy inferior a los 0 ºC. Finalmente se congela a -48,33 ºC. Imagen: Universidad de Utah.

La caja está llena de agua líquida (blanco). El líquido súper enfriado empieza a convertirse en ‘hielo intermedio’ (verde), de camino a la congelación (rojo), en una temperatura muy inferior a los 0 ºC. Finalmente se congela a -48,33 ºC. Imagen: Universidad de Utah.

SINC | 23 noviembre 2011 19:00

Las científicas han observado un cambio de estructura intermedio, entre el agua líquida y sólida, caracterizada por la disposición de las moléculas en tetraedros

¿Cuál es la menor temperatura a la que puede ‘resistir’ el agua líquida antes de convertirse en sólido? Un grupo de científicas de la Universidad de Utah (EE UU) han analizado con técnicas computacionales los factores que controlan la formación de hielo en agua ‘súper enfriada’ y ha comprobado que aguanta hasta los -48 ºC sin congelarse.

El cambio de estado de agua líquida a sólida, comienza en una región pequeña con un proceso llamado nucleación. En ese punto se crean los primeros cristales, sobre los cuales arranca el fenómeno de solidificación del líquido.

Las impurezas que a menudo lleva el agua actúan como núcleos que inducen su cristalización. Sin embargo en el agua pura, donde no hay partículas ni cristales que actúen como núcleos, es necesario que caigan mucho más las temperaturas para que se produzca una nucleación homogénea de hielo.

“En temperaturas cercanas a los -50 ºC la cristalización ocurre de manera muy rápida. Por encima de esta temperatura, el ritmo de formación de hielo está limitado por la capacidad de crear minúsculas semillas de hielo, a partir de las cuales crece la congelación”, explica a SINC Valeria Molinero, coautora del estudio y química de la Universidad de Utah.

Hasta ahora, se había conseguido observar experimentalmente este estado líquido súper enfriado del agua pura con temperaturas cercanas a la de nucleación, pero el mecanismo de cristalización del hielo no se había descifrado. Se desconocía tanto el tamaño como la estructura del núcleo crítico, donde empieza el proceso.

“La rapidez con la que el agua a muy bajas temperaturas cambia de estado está determinada por la transformación previa de la estructura del agua líquida en una disposición similar al hielo, aunque todavía desordenada”, explica la investigadora.  “La formación de hielo está determinada por la movilidad de las partículas”.

Las investigadoras de la Universidad de Ohio han estudiado este proceso mediante simulaciones con ordenador, y han observado que está determinado por un cambio de estructura, en la que predominan las moléculas ligadas en forma de tetraedro, donde cada una está unida debilmente a las otras cuatro.

“El agua es un liquido anómalo. Por ejemplo, decrece su densidad con temperaturas más bajas que -40 ºC, y aumenta su capacidad calorífica”, señala Molinero. “Nosotras hemos mostrado que estas extrañas propiedades vienen del proceso intermedio de cambio de estructura”.

**Agua líquida a menos de 0 ºC**

El cambio de estado en el agua pura no sucede siempre a 0 ºC, como nos enseñan en el colegio. “0 ºC es la temperatura de fusión. La congelación ocurre en este punto cuando hay algún sustrato que ayude a la formación de los primeros cristales, sobre los que crecerá el hielo”, detalla Molinero. En esa región pequeña pero estable se produce el fenómeno de nucleación, que da comienzo al cambio de fase.

Las impurezas del agua actúan como ‘disparadores’ que inducen la cristalización, pero en sistemas puros la temperatura puede descender muy por debajo de los 0º (hasta los -48,33 ºC, según estos recientes resultados).

Las científicas han observado un cambio de estructura intermedio, entre el agua líquida y sólida, caracterizada por la disposición de las moléculas en tetraedros. “La sustancia cambia físicamente, en una forma en la que cada molécula de agua está ligada de manera flexible a otras cuatro moléculas, parecida a la del hielo, y que determina la temperatura en la que se congela el líquido”, describe Molinero.

El aumento de la proporción de las cuatro partículas coordinadas entre sí en la masa todavía líquida provoca la cristalización. “El cambio de fase no está controlado solo por la temperatura, sino también por la transformación estructural del líquido”, afirma la investigadora.

**Computación del líquido**

El proceso de cristalización se inicia súbitamente cuando se alcanza la temperatura requerida, con una velocidad tan alta que dificulta su observación. Las investigadoras han utilizado modelos computacionales de agua, bastante sencillos, sobre los que han podido realizar simulaciones del líquido súper enfriado.

 “Los ordenadores, a través de la simulación, nos han dado una visión microscópica que los experimentos por ahora no pueden alcanzar”, asegura Molinero.

Estos resultados hacen posible prever la rapidez de la cristalización del agua, lo que puede ser útil para desarrollar modelos predictivos de ritmos y temperaturas de congelación del agua en materiales complejos o en condiciones particulares.

Emily B. Moore y Valeria Molinero. “Structural transformation in supercooled water controls the crystallization rate of ice”. *Nature*. 24 de noviembre de 2011.