FISICO-MATEMATICA DE LAS REACCIONES DE BELOUSOV-ZHABOTINSKY

Joaquín González Álvarez

Resumen

Se realiza una exposición sobre el fundamento de las reacciones oscilatorias de Belousov-Zhabotinsky explicando en forma sintética el proceso de tratamiento de los sistemas dinámicos que conforman el basamento teórico de las mismas.

Introducción

El físico ruso B. Belousov en 1959, intentando modelar el ciclo biológico de Krebs en el laboratorio mediante la reacción de oxidación-reducción en la cual interviene como oxidante el ión bromato y como reductor el ácido malónico, actuando como catalizador el catión cerio, notó asombrado cambios periódicos espontáneos de coloración de amarillo a incoloro y vuelta a amarillo, una y otra vez en lapsos de aproximadamente un minuto (1).

Boris Belousov (1893-1970)

Anatol Zhabotinsky(1938-)

Continuó las investigaciones el también ruso A. Zhabotinsky y llegó a elaborar la fundamentación teórica de las reacciones oscilatorias sirviéndose del tratamiento físico-matemático de los sistemas dinámicos aplicados a procesos no-lineales alejados del equilibrio. Zhabotinsky presentó los resultados de sus investigaciones en un evento donde asistieron países occidentales aprovechando la presencia de éstos.

Desarrollo
El proceso químico real es sumamente complicado al producirse múltiples reacciones intermedias, por lo que se acudió a modelaciones y aproximaciones que hicieran viable el tratamiento matemático manteniendo la esencia de lo investigado.

Una primera aproximación para el modelo consistió en utilizar como reactivos

$$ClO_2 - I_2 - Ma$$

para una reacción que semeja bastante al proceso real que se investiga.

Las concentraciones de los reactantes citados varían durante el proceso mucho mas lentamente que los productos intermedios I^- y ClO_2^- por lo cual, se hizo una última aproximación suponiendo constantes las concentraciones de los citados reactantes de variación lenta. De esta forma el sistema dinámico no-lineal para proceso alejado del equilibrio se toma de manera simplificada así:

$$dx/dt = a - x - 4xy/(1 + x^2) \qquad (1)$$

$$dy/dt = bx\,(1 - y/(1 + x^2)) \qquad (2)$$

donde x e y son las concentraciones adimensionales de I^- y ClO_2^- respectivamente y a,b parámetros que dependen de las concentraciones que varían lentamente asumidas como constantes (2).

Antes de pasar a tratar el sistema dinámico (1-2), vamos a realizar una resumida alusión a los conceptos y procedimientos propios de esos sistemas en general. Para ello nos referiremos al retrato fásico de un sistema. En dicho retrato aparecen las trayectorias fásicas (lugar geométrico de los puntos representativos o puntos fásicos de los distintos estados en que puede encontrarse el sistema físico que se examina) en el sistema de coordenadas x-y o plano fásico, de las cuales puede hacerse un boceto dibujando en varios puntos fásicos pequeñas saetas con pendientes dadas por dy/dx calculadas para cada punto, todas las cuales darán idea del campo vectorial del sistema. Las trayectorias se trazan tangentes a las saetas y en sus direcciones. Podrán presentarse uno o varios puntos para los cuales dx/dt y dy/dt se hacen cero a los cuales se les denomina puntos fijos o estacionarios. Si hacia esos puntos se dirigen algunas trayectorias, el punto fijo es de estabilidad o nodo estable y si por contrario salen del punto fijo, ese será un foco inestable o repulsor. Las trayectorias al salir del foco suelen hacerlo en forma de espiral. Estas espirales para ciertos valores de los parámetros, algunas veces se enrollan conformando una órbita cerrada o un ciclo límite. Una órbita cerrada sólo adquirirá la condición de ciclo límite si no encierra un punto fijo que no sea un foco o repulsor. Los ciclos límites son muy importantes en problemas como el que nos ocupa, pues su existencia motiva que, el estado representado por cualquier punto del ciclo, se repetirá cada vez que el sistema "de una vuelta completa" recorriendo todos los demás estados o puntos fásicos de la trayectoria cerrada. Tal cosa explica el carácter oscilatorio de algunos procesos como el de las reacciones oscilatorias que nos ocupan. Por ejemplo cuando para un estado (x, y), aparezca una coloración de la masa reaccionante, ese color aparecerá de nuevo al volver el sistema "en su recorrido" al mismo punto (x,y) del ciclo.

En el tratamiento matemático del sistema (1)-(2) veremos el cumplimiento de lo expuesto (3).

Llamaremos f y g a los segundos miembros de las ecuaciones del sistema. Comenzamos por calcular las coordenadas del punto fijo, resolviendo el sistema df/dt=0 y dg/dt=0. Las coordenadas son $x^*=a/5$ y $y^*= 1 + (a/5)^2$.

Para determinar si se trata de un nodo o un foco, se halla el Jacobiano $J=\partial(f,g)/\partial(x,y)$ y se evalúa para las coordenadas del punto fijo.

$$J = \frac{1}{\left(1+x^{*2}\right)} \begin{vmatrix} 3x^{*2}-5 & -4x^{*} \\ 2bx^{*2} & -bx^{*} \end{vmatrix}$$

Si se comprueba que el determinante del Jacobiano $(\partial f/\partial x)(\partial g/\partial y)-(\partial f/\partial y)(\partial g/\partial x)$ es mayor que cero y que para los debidos valores de los parámetros a y b, la traza $\partial f/\partial x + \partial g/\partial y$ es también mayor que cero, el punto fijo será un foco repulsor, podrá existir el ciclo límite en instalarse el régimen oscilatorio. Y eso es precisamente lo que ocurre en las reacciones Belousov-Zhabotinsky.

Conclusiones

En lo esencial hemos mostrado el basamento físico-matemático de este singular ejemplo de procesos oscilatorios espontáneos.

Casos de procesos oscilatorios explicables por la ocurrencia de ciclos límites como el de las reacciones de Belousov-Zhabotinsky, se presentan en los procesos circadianos, los latidos del corazón y similares, no sólo en el ámbito de la química o de la biología, también se encuentran en fenómenos físicos y de otra índole.

Referencias

(1) Volkenshtein, M. V. Biofísica. Editorial Mir. 1985.
(2) Strogatz, S. H. Non Linear Dynamics and Chaos. Perseus Books Publishing. 2000.
(3) J. González Álvarez. Tratamiento de los Sistemas Dinámicos. www.casanchi.com. 17/6/2006.

Joaquín GONZÁLEZ ÁLVAREZ
j.gonzalez.a@hotmail.com