

La biología cuántica ¿un nuevo campo de la química?

Carlos Amador-Bedolla^a y Alán Aspuru-Guzik^b

ABSTRACT (Quantum biology: a new field of chemistry?)

Over the past century quantum mechanics has been widely applied in the understanding of several physical phenomena. In chemistry, particularly, quantum mechanics have been fundamental for confirmation of chemical insights, and for the description, rationalization and prediction of lots of chemical details. However, and notwithstanding some early speculations, mainstream thinking pointed to the idea that quantum effects are not directly responsible for the description of chemical phenomena involved in life, favoring application of classical mechanics to effectively describe dynamic properties of proteins, DNA, cell membranes, for example. Recent experimental and theoretical developments show that quantum effects are essential in a few fundamental chemical biology processes. In this paper we present a description of these findings in the study of photosynthesis.

KEYWORDS: Quantum biology, photosynthesis, green sulfur bacteria, quantum coherence, open quantum systems, femtochemistry

Introducción

La combinación de un proceso de selección natural aleatorio y un largo periodo de tiempo produce resultados singulares, inesperados y complejos. Tanto así que no es tan sorprendente que de vez en cuando los humanos nos vayamos por la puerta falsa de la creencia en el diseño inteligente. Porque, hasta donde entendemos, todo lo que en la vida ha sido posible es resultado de la combinación de tiempo y ensayos. El que nos interesa en esta ocasión es la forma en que la vida obtiene energía.

Muchos productos de esa intrincadísima prueba y selección de procesos —los seres humanos, los escarabajos peloteros— podemos obtener energía de fuentes tan elaboradas como los carbohidratos, los glúcidos y los lípidos; pero, a fin de cuentas, toda esa energía tiene que provenir de la energía solar, que es la única que ha mostrado su constancia y su abundancia en la escala temporal que corresponde a la evolución. Así, si se quiere entender el origen más básico de la vida, tenemos que atender la absorción de luz solar por parte de los seres vivos: la fotosíntesis.

Y los químicos hemos atendido el estudio de la fotosíntesis desde diversos ángulos. Así hemos logrado localizar los organismos celulares donde se lleva a cabo —por ejemplo los clorosomas—, identificar pigmentos como la clorofila o los carotenos, conocer sus tipos, descubrir rutas de su biosíntesis, etcétera. Aún así, débiles como somos a las tentaciones del reduccionismo, nos llama la atención estudiar el fenómeno fotosintético con base en el proceso más elemental posible:

¿cómo se absorbe la luz —el fotón— que llega a la célula? ¿Cómo se transmite la energía absorbida —contenida en varias moléculas excitadas— a la creación de un nuevo enlace químico, por ejemplo en ATP?

Desde la invención de la ciencia moderna nos hemos dedicado a buscar descripciones de los fenómenos más complejos con base en un número reducido de procesos fundamentales. Newton nos hizo pensar que tres ecuaciones —muy sencillas, si mucho nos apuran— describen todo: el sistema solar, el clima, el funcionamiento de un motor, el vuelo de un avión. Schrödinger y sus contemporáneos acabaron con esa ilusión sólo para reemplazarla con la de la mecánica cuántica, que sustituye una de las ecuaciones de Newton por otra un poco más compleja, y que nos hizo creer, durante muchos años, que el reemplazo sólo era necesario para explicar lo que ocurre con cosas muy pequeñas a temperaturas muy bajas. Los efectos cuánticos son indispensables para describir el mundo, pero una vez tomados en cuenta, el mundo de lo grande y templado se describe clásicamente.

Ahí se ve a Schrödinger y sus colegas, en la famosa fotografía de la conferencia Solvay de 1927, luego de encontrar esas ideas fundamentales que, suponemos, lo describen todo. De una fecha cercana proviene el *dictum* de Dirac:

Las leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de una gran parte de la física y de la totalidad de la química se conocen ahora por completo, y la única dificultad es que la aplicación exacta de esas leyes lleva a ecuaciones demasiado complicadas para resolverse...

Los experimentos recientes

Un fotón se absorbe, promueve un electrón a un estado (cuántico) de más alta energía, las moléculas excitadas transfieren esa energía a un aceptor que se encargará de separar esa exci-

^a Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.

^b Department of Chemistry and Chemical Biology, Harvard University.

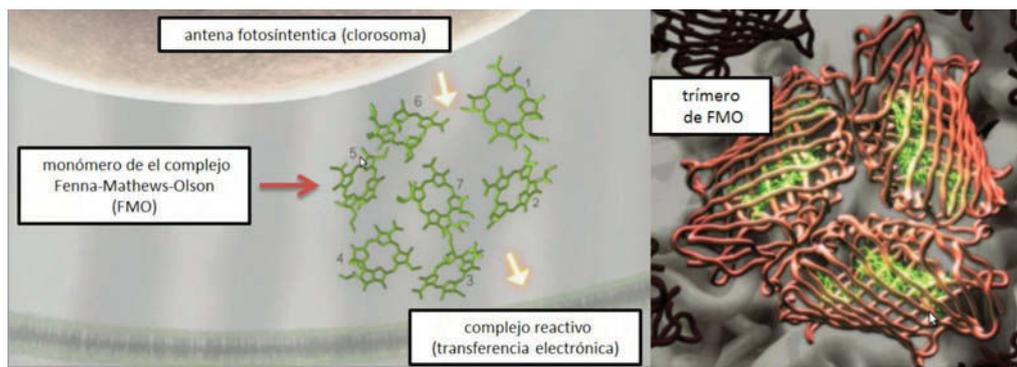


Figura 1. Izquierda. Esquema de la transferencia energética que ocurre en la bacteria fotosintética verde *Chlorobium tepidum*. La energía es absorbida por cientos de miles de clorofilas en el clorosoma y es transferida hacia el centro reactivo a través del trímero del complejo Fenna-Matthews-Olson (FMO). Conforme la energía es transferida, parte de ella es disipada a las vibraciones de la proteína, creando un embudo energético (*energy funnel*) que culmina en una absorción de la excitación en el centro reactivo con casi 100% de eficiencia. Derecha. Cada subunidad tiene siete bacterioclorofilas, más una octava que ha sido recientemente descubierta que se comparte entre las tres subunidades (la octava clorofila no es mostrada).

tación como un electrón y un hoyo (ausencia de electrón) e iniciar una cadena de eventos químicos cuyo desenlace es el de formar el enlace químico que la almacene hasta que haga falta. ¿Cómo ocurre exactamente este fenómeno?

Recientemente (Beatty *et al.*, 2005) se descubrió la existencia de complejos fotosintéticos en bacterias que viven en el fondo del mar —a donde no entra nadie, nunca, como en los *dire straits* de Cortázar— donde pueden absorber cuando mucho un fotón por minuto. La luz es absorbida por un organismo llamado clorosoma, que en el caso de estas bacterias verdes sulfúricas *Chlorobium tepidum*, es probablemente la antena fotosintética más eficiente de todas las que existen. Presumiblemente, el sistema de este organismo ha evolucionado para tener una eficiencia casi perfecta para transferir la luz, una vez absorbida, al centro de reacción donde se inicia la química de la vida. El clorosoma está compuesto de más de cien mil moléculas de bacterioclorofila y un número menor de carotenos que se autoorganizan en “rollos” que el profesor Doug Bryant de Penn State University llama “chorizos de Andouille”. La estructura de estos rollos ha sido elucidada recientemente por el grupo de Huub de Groot en Holanda (Ganapathy *et al.*, 2009). Estas estructuras de cientos de nanómetros, están adyacentes a una placa de clorofilas que a su vez transfiere la energía hacia el centro de reacción a través de unos complejos fotosintéticos asociados a la membrana (figura 1), llamados complejos FMO —por Fenna, Matthews y Olson, sus descubridores (Fenna & Matthews, 1975). El complejo FMO que tiene sólo siete bacterioclorofilas sirve como un “cable” con una eficiencia de transporte desde la antena del clorosoma hasta el centro reactivo de más de 98%, y es lo suficientemente simple para haberse convertido en un complejo favorito, por parte de teóricos y experimentales, para intentar respuestas a las preguntas planteadas anteriormente. El complejo es fácilmente soluble y, por lo tanto, fue de las

primeras estructuras fotosintéticas de las que se tuvieron estructuras de rayos X.

Es momento de analizar el transporte de la antena al centro reactivo. La explicación tradicional, luego del advenimiento de la mecánica cuántica, es semiclásica: cuando se absorben fotones, el complejo FMO se excita y puebla los estados excitados de las 22 clorofilas que lo forman y que tienen energías ligeramente distintas. Los electrones en estados excitados se transfieren a proteínas de menor energía hasta llegar a la más cercana al aceptor —la zona del complejo que hará el siguiente paso en el alma-

namiento de energía— donde la excitación electrónica es probablemente convertida en una excitación de transferencia de carga que a su vez, inicia una transferencia electrónica. O eso creíamos hasta hace muy poco.

En la década de los ochenta, Ahmed Zewail —premio Nobel en 1999 (Zewail, 1999)—, entre otros, inventó la espectroscopía de femtosegundos. Con el avance de la tecnología del láser se logró crear aparatos capaces de enviar pulsos de luz ultra cortos a los sistemas químicos. Dos paquetes de radiación láser se envían con unos cuantos femtosegundos de diferencia: el primero excita las moléculas de los reactivos y el segundo detecta la naturaleza de las moléculas de los productos o de los compuestos intermediarios. Esto permite ver cómo y en cuánto tiempo cambian las moléculas durante una reacción química. No es extraño que gracias a esta nueva técnica la química haya vivido una revolución, porque gracias a esta espectroscopía, muchos de los efectos que sospechábamos pudieron ser comprobados o refutados.

Y en 2007 se aplicó esta técnica al problema que nos ocupa. El equipo de Graham Fleming, de la Universidad de California, Berkeley (Engel *et al.*, 2007) empleó las técnicas de la espectroscopía de femtosegundos para estudiar la transferencia energética dentro de complejos de FMO en solución. La técnica utilizada es conocida como espectroscopía de cuatro ondas (*four-wave mixing*) y es un análogo óptico de la resonancia magnética nuclear bidimensional. Para sorpresa de propios y extraños, se encontró que la evolución de la excitación debida a la absorción de luz mostraba la existencia de coherencia cuántica electrónica de larga duración (cientos de femtosegundos). Es decir que, en lugar de que la excitación brinque probabilísticamente de un estado de excitación colectivo de las clorofilas (conocido como *excitón*) a otro, como predeciría un abordaje semiclásico, la excitación oscila como onda —de manera cuántica— entre los diferentes excitones que se

forman en las siete clorofilas, se traslada entre ellas de manera cuántica y, todavía más, durante ese proceso —que dura más de 600 fs— se preserva la coherencia cuántica, es decir, se conserva la fase. Recuérdese que en la interacción entre ondas —y los electrones se describen por funciones de onda— es fundamental la diferencia de fase que exista entre ellas. Si la fase es la misma, la interacción es constructiva y las ondas se amplifican, mientras que si la fase difiere en la mitad de la frecuencia, la interacción es destructiva y las ondas se anulan. En el experimento de Engel probablemente existen interacciones tanto constructivas como destructivas; lo que se sabe es que la diferencia de fases es constante, es decir, la excitación es coherente.

El experimento de Engel y colaboradores sugiere que es probable que en condiciones naturales, la excitación se pudiera trasladar gracias a un efecto cuántico. Si esto se corrobora, la fotosíntesis emplearía los efectos de la mecánica cuántica para ocurrir. Esto ya es interesante, pues implica que la biología cuántica es fundamental. Pero hay más, porque el experimento de Engel se realizó a 77K, una temperatura muy baja para convencer a los biólogos pero muy alta para no poner nerviosos a los teóricos cuánticos, ya que según creíamos, los efectos cuánticos sólo son importantes a bajas temperaturas.¹ Y los estudios experimentales se han seguido dando a gran velocidad. Meses después del descubrimiento de la coherencia en el transporte energético de la excitación en esta bacteria se confirmó su existencia (Lee, Cheng & Fleming, 2007) a 180K, temperatura mucho más alta —ya cercana a la que esperaban los biólogos y muy alta para los cuánticos—. Y ya para terminar con posibles especulaciones acerca de la existencia de esta coherencia cuántica entre los estados excitados que transfieren la energía absorbida, recientemente se han podido confirmar estas observaciones a cero grados Celsius (Pantchayangkoon *et al.*, 2010) y a temperatura ambiente (Collini *et al.*, 2010). Estas persistencias de la coherencia, que pueden llegar hasta el rango de picosegundos en los experimentos de Greg Scholes, de la Universidad de Toronto (Collini *et al.*, 2010) sugieren que tal vez la coherencia cuántica juegue un papel en la transferencia natural. Estudios detallados que exploren la transferencia energética en condiciones naturales son necesarios para clarificar cuántas oscilaciones existen en condiciones de iluminación solar y no por láseres.

Las contribuciones teóricas

Ahora lo que se discute es, de nuevo, cómo ocurre este fenómeno. Y quienes han planteado los mecanismos más factibles son los teóricos (químicos, biólogos y físicos). Uno de los autores de este artículo (Alán Aspuru-Guzik) ha trabajado en el

entendimiento de cuáles serían las consecuencias de estas oscilaciones cuánticas en la eficiencia del complejo fotosintético. Los primeros resultados que se obtuvieron en su grupo de trabajo indican que la descripción del fenómeno cuántico requiere considerar tanto la coherencia entre los estados excitados, como su interacción con los alrededores, requiriendo un análisis que incluye a la mecánica cuántica de sistemas abiertos (Mohseni, Rebentrost, Lloyd & Aspuru-Guzik, 2008). Ahí se detectó la competencia entre el mecanismo coherente —estable, constante en función del tiempo— con el mecanismo de difusión de energía del complejo a los alrededores —el fenómeno de defasamiento o pérdida de coherencia. Interesantemente, los resultados parecen indicar que ambos son necesarios y que el proceso óptimo —que coincide con el experimentalmente observado— ocurre ante una mezcla de ambos efectos (Rebentrost *et al.*, 2009).

Ingresemos brevemente en ese mundo. Imaginemos un proceso cuántico que puede producir uno de dos estados con probabilidad de 50%. Imaginemos que lo acondicionamos con un proceso abierto que puede interactuar con uno de los dos estados. Así, cuando tratamos de interactuar con el proceso cuántico ocurre una de dos cosas: o interactuamos con él, lo que indica que estaba en el estado A —y al hacerlo lo destruimos—, o no interactuamos con él porque estaba en el estado B. Luego de un rato de estar interactuando con él, el ensamble de ese sistema va a estar en el estado B con probabilidad cercana al 100%, porque si no interactuamos con el proceso cuántico es que estaba en B, y si lo hacemos —porque estaba en A— lo destruimos: la mitad de los sistemas que estaban en A los regresamos a poblarse con probabilidad de 50%, o sea que sólo quedan 25% en A, y a esos los volvimos a destruir regresándolos a 50% A y 50% B, por lo que ahora hay $(1/2)*(1/4) = 12.5\%$ en A, y repetimos el proceso dejando $(1/2)*(1/4)*(1/8) = 1.6\%$, etcétera, etcétera, hasta que no queda casi nada en A. ¿Verdad que se parece esto a la paradoja de Zenón de Elea, ésa de la tortuga y la liebre? Pues así se le llama a este efecto: efecto de Zenón. Empleando estas ideas, el equipo mencionado (Rebentrost *et al.*, 2009) estimó la tasa de defasamiento como función de la presencia de efectos de coherencia cuántica y los efectos de defasamiento debida a la interacción con los alrededores. La eficiencia del proceso de transferencia de energía es máxima cuando estos dos extremos se combinan: ni Zenón ni coherencia perfecta, sino ENAQT (transferencia cuántica asistida por el ambiente o “baño”, en inglés, ENvironmentally Assisted Quantum Transport). Véase la figura 2.

Sus consecuencias (hasta ahora...)

En octubre de 2010 se llevó a cabo la 22 Conferencia Solvay de química. Estas 22 conferencias de química en casi 100 años, junto con las 24 que van de física, indican que éstas se organizan muy de vez en cuando, algo así como los mundiales de fútbol, cada cuatro años. La 22 Conferencia Solvay de química trata de Efectos Cuánticos en Química y Biología, lo que debe tomarse como indicación del interés que estos descubri-

¹ No hace mucho que descubrimos los primeros efectos cuánticos observables en sistemas macroscópicos. En 1985, se otorgó el premio Nobel de física a Klaus von Klitzing por el descubrimiento del efecto Hall cuántico. Una forma cuántica de medir con extraordinaria precisión la unidad fundamental de carga.

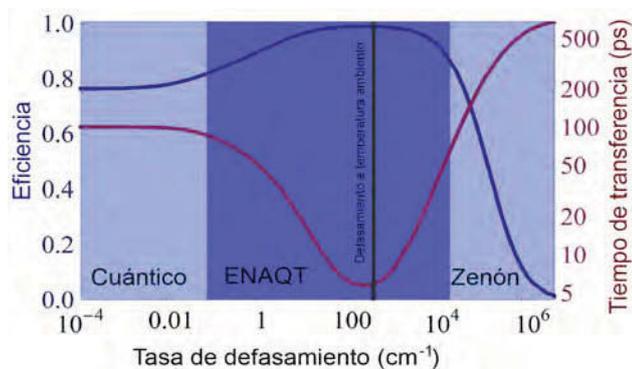


Figura 2. Eficiencia (en azul, curva superior) y tiempo de transferencia (en rojo, curva inferior) como función de la tasa de defasamiento puro según se aplica al complejo Fenna-Mathews Olson (FMO). La transferencia totalmente cuántica (a la izquierda) en el defasamiento ocurre sólo por la aparición de desorden intrínseco, también conocido como localización cuántica. El fenómeno de Zenón cuántico (*quantum Zeno effect*) (a la derecha) en el que el defasamiento es tan fuerte que la transferencia es inhibida. En medio encontramos la eficiencia óptima, una combinación de ambos efectos. La tasa de desfasamiento predecida por el modelo de Redfield, y aplicada al de Haken-Strobl (Rebentrost *et al.*, 2009) lleva a una eficiencia máxima de transporte a temperatura ambiente. Experimentos posteriores (Panitchayangkoon *et al.*, 2010) corroboraron la predicción teórica.

mientos están teniendo en nuestras interpretaciones de la biología. (Uno de los autores de este artículo fue invitado, junto con otros 43 científicos, a esta conferencia.) ¿La cuántica influye en los procesos biológicos? ¿Los procesos biológicos —seleccionados por la evolución— incluyen efectos cuánticos por sus ventajas evolutivas? Algunas de esas hipótesis se estudian en la actualidad con esmero. Por ejemplo, se especula que en la visión empleada en el vuelo de las aves son fundamentales los efectos cuánticos (Cai, Guerreschi & Briegel, 2010). También se especula si el proceso olfatorio —el que detecta olores y es fundamental en diversos aspectos vitales— depende de vibraciones moleculares caracterizadas por tunelaje electrónico inelástico (Turin, 2002). Todas éstas son las preguntas que la nueva, inesperada, aplicación de la química (a través de la mecánica cuántica) busca responder. La biología cuántica contribuirá, sin duda, a elucidar detalles del extraordinario proceso evolutivo que nos permite interpretar a la vida.

Uno de los retos que Graham Fleming, el organizador de la conferencia, lanzó al concluir las discusiones que se llevaron a cabo durante varios días, fue que todavía se requiere el esfuerzo de los teóricos (en particular la gente que trabaja en el área de información cuántica) para producir nuevas herramientas teóricas para entender estos fenómenos que ocurren en los sistemas biológicos, y por parte de los experimentales a desarrollar nuevos experimentos, tal vez más complejos, que elu-

ciden con más detalle cómo suceden estos fenómenos, e identifiquen el papel probable de la mecánica cuántica en estos fenómenos biológicos.

Referencias

- Beatty, J. T., Overmann, J., Lince, M. T., Manske, A. K., Lang, A. S., Blankenship, R. E., Van Dover, C. L., Martinson, T. A. & Plumley, F. G., An obligately photosynthetic bacterial anaerobe from a deep-sea hydrothermal vent, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **102**, 9306-9310, 2005.
- Cai, J., Guerreschi, G. G. & Briegel, H. J., Quantum control and entanglement in a chemical compass, *Physical Review Letters*, **104**, 220502, 2010.
- Collini, E., Wong, C. Y., Wilk, K. E., Curmi, P. M. G., Brumer, P. & Scholes, G. D., Coherently wired light-harvesting in photosynthetic marine algae at ambient temperature, *Nature*, **463**, 644-647, 2010.
- Engel, G. S., Calhoun, T. R., Read, E. L., Ahn, T. K., Mancal, T., Cheng, Y. C., Blankenship, R. E. & Fleming, G. R., Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems, *Nature*, **446**, 782-786, 2007.
- Fenna, R. E. & Matthews, B. W., Chlorophyll arrangement in a bacteriochlorophyll protein from *Chlorobium limicola*, *Nature*, **258**, 573-577, 1975.
- Ganapathy, S., Oostergetel, G. T., Wawrzyniak, P. K., Reus, M., Chew, A. G. M., Buda, F., Boekema, E. J., Bryant, D. A., Holzwarth, A. R. & de Groot, H. J. M., Alternating syn-anti bacteriochlorophylls form concentric helical nanotubes in chlorosomes, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **106**, 8525-8530, 2009.
- Lee, H., Cheng, Y.-C. & Fleming, G. R., Coherence dynamics in photosynthesis: protein protection of excitonic coherence, *Science*, **316**, 1462-1465, 2007.
- Mohseni, M., Rebentrost, P., Lloyd, S. & Aspuru-Guzik, A., Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer, *Journal of Chemical Physics*, **129**, 174106, 2008.
- Panitchayangkoon, G., Hayes, D., Fransted, K. A., Caram, J. R., Harel, E., Wen, J., Blankenship, R. E. & Engel, G. S., Long-Lived Quantum Coherence in Photosynthetic Complexes at Physiological Temperature, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **107**, 12766-12770, 2010.
- Rebentrost, P., Mohseni, M., Kassal, I., Lloyd, S. & Aspuru-Guzik, A., Environment-assisted quantum transport, *New Journal of Physics* **11**, 033003, 2009.
- Turin, L., A Method for the Calculation of Odor Character from Molecular Structure, *Journal of Theoretical Biology*, **216**, 367-385, 2002.
- Zewail, A. H., Atomic-scale Dynamics of the Chemical Bond Using Ultrafast Lasers. *Nobel Lecture*, December 8, 1999. (Consultada en http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1999/zewail-lecture.pdf, el 2 de octubre de 2010).