

# Química: Europa y el futuro (II)

Continuación del Informe elaborado por la Alianza  
para las Ciencias y Tecnologías Químicas en Europa (AllChemE)

## LOS PROCESOS DE LA VIDA

La implicación de los químicos en el ámbito de las ciencias de la vida, en estrecha colaboración multidisciplinar con biólogos, médicos y agrónomos, ha dado origen al descubrimiento de nuevos productos, que incluyen fármacos y materiales para la medicina y la salud pública, y también nuevos productos para la agricultura, que están permitiendo una obtención más eficiente y segura de alimentos.

Algunas de las enfermedades que históricamente han sido causa de gran mortalidad están ahora casi erradicadas, si bien la lucha contra la enfermedad debe continuar. Debemos también resolver los problemas de la desnutrición y de la escasez de alimentos, que todavía siguen siendo responsables de una gran mortalidad.

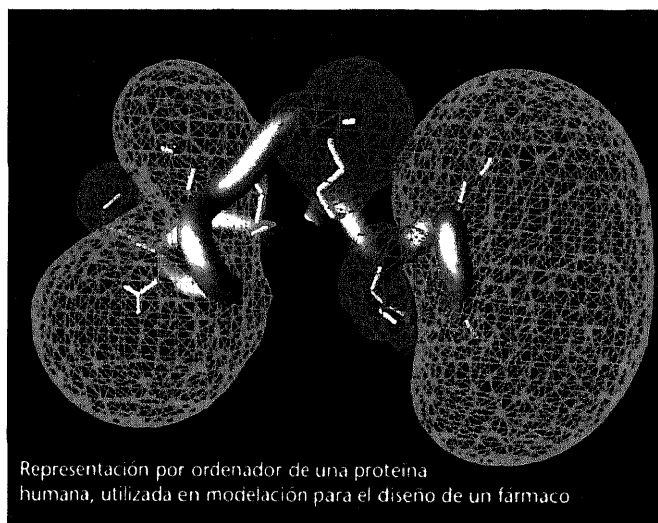
### LA COMPRESIÓN DE LA QUÍMICA DE LA VIDA

Para comprender la química de los procesos que sustentan la vida es esencial desentrañar sus reacciones químicas básicas. El problema se ha podido ir resolviendo, especialmente durante las últimas décadas, a medida que se han ido conociendo las estructuras de importantes moléculas biológicas como el ADN, las enzimas, las proteínas o los anticuerpos.

Este conocimiento ha sido la clave del extraordinario progreso de la biología y la medicina modernas. Este campo de la biología estructural es el gran reto para la espectroscopía y los recursos estructurales de la química. Al entrar en él se ha iluminado y esclarecido nuestra comprensión de los

mecanismos químicos implicados en los procesos fisiológicos, ofreciéndonos la posibilidad de actuar sobre ellos para mantenerlos o corregirlos, lo que ha conducido a grandes progresos en el cuidado de la salud.

Los avances en la biología estructural y en la química biológica requie-



Representación por ordenador de una proteína humana, utilizada en modelación para el diseño de un fármaco

ren aislar y purificar los componentes químicos de sistemas vivos y su identificación estructural mediante cristalografía de rayos X, espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN), espectrometría de masas y microscopía electrónica. Estas técnicas pueden complementarse con la utilización del sincrotrón y las fuentes de radiación de neutrones disponibles en el Centro Internacional Europeo de Grenoble, Instituto Laue Langevin (ILL) y en el Centro de Investigación Europeo del Sincrotrón (CEI).

El constante perfeccionamiento de estas técnicas físico-químicas permite estudiar pequeñas cantidades de materia biológica.

### Simulación y Modelación

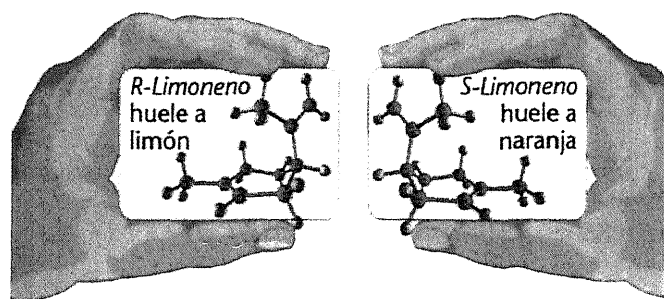
La simulación y modelación con ordenador se han convertido en valiosas herramientas para el estudio de las características estructurales, dinámicas y termodinámicas de los complejos sistemas bioquímicos. Estas técnicas no sola-

mente pueden ayudar a interpretar la estructura de moléculas muy complejas, sino que también arrojan luz sobre el modo en que esas moléculas mantienen o pierden su configuración al disolverse. Estas técnicas también evidencian cómo dos moléculas biológicas de gran tamaño se reconocen mutuamente y ajustan sus estructuras como preparación a una reac-

ción biológica. Los programas de "modelación" se basan en métodos derivados de la química teórica o en el perfil de un modelo empírico derivado de moléculas sencillas. Estas técnicas son inestimables en el diseño racional de principios activos para la industria farmacéutica (véase más adelante).

### Química Biomimética

La química biomimética es el campo de la simulación o modelación experimental de sistemas biológicos, en el que los químicos tratan de imitar los complejos sistemas naturales empleando sistemas químicos artificiales menos complicados. Estos estudios contribuyen considera-



blemente al conocimiento de la química de las reacciones biológicas y conducirán a la invención de procesos químicos totalmente innovadores y a nuevos materiales útiles para la industria y la sociedad.

## DESCUBRIMIENTO, INVENCION Y SÍNTESIS DE NUEVOS FÁRMACOS

Muchos fármacos que se emplean actualmente se descubrieron por el tradicional sistema farmacéutico de selección de sustancias aisladas de fuentes naturales. Estas fuentes naturales -generalmente plantas, organismos y microorganismos marinos-, constituyen un fantástico "almacén" de moléculas, muchas de las cuales aún han de ser seleccionadas para determinar sus potenciales propiedades farmacéuticas. Algunas sustancias corresponden a productos químicos aislados de fuentes naturales utilizadas por la medicina popular. La actividad de estos compuestos naturales también pueden mejorarse por modificación química de su estructura natural.

Puede ocurrir que la fuente natural de un potente y eficaz fármaco no pueda proporcionar el componente activo en cantidad suficiente para satisfacer las necesidades médicas. En tal caso, es necesario recurrir a una síntesis química eficaz. Por ejemplo, el compuesto químico Taxol es muy activo contra el cáncer de ovario y de mama, pero la molécula solamente se aísla en cantidades muy pequeñas de la corteza del *Taxus Baccata* (tejo). Sin embargo, la molécula activa obtenida de la corteza es, en realidad, un conjunto de dos componentes, cuya parte principal también puede obtenerse en cantidades significativas de las agujas de

pino del tejo. La combinación de este material, producido naturalmente, con el componente secundario-obtenido por síntesis química directa, constituye el Taxol, virtualmente idéntico al obtenido de la corteza.

Durante el proceso de síntesis en laboratorio, se obtiene un producto intermedio, el Taxotere (TM), que es aún, más activo que el propio Taxol.

## Química Combinatoria

El enfoque tradicional del método de selección para el descubrimiento de nuevos fármacos tiene una reducida probabilidad de éxito (por término medio, no más de un fármaco eficaz en más de 20.000 productos "tamizados"). La química combinatoria ha revolucionado recientemente el sistema para el descubrimiento de nuevos fármacos al permitir la selección entre un enorme número de moléculas. Esta nueva técnica puede aplicarse tanto a pequeñas moléculas como a macromoléculas tales como las proteínas, las nucleótidos y los hidratos de carbono. Con ella puede investigarse un gran número de sustancias en busca de una actividad farmacológica específica, con nuevos sistemas de selección automatizados que utilizan las estructuras naturales que son aplica-

bles a ciertas enfermedades. Estos receptores, enzimas, intermedios, etc., pueden obtenerse en cantidades útiles utilizando la tecnología génica. Esta nueva velocidad de selección va a tener un impacto considerable sobre la eficacia de los procesos de investigación y descubrimiento de nuevos fármacos.

## Diseño de fármacos asistido por ordenador

Los métodos de modelación y simulación molecular, el diseño racional y los estudios por ordenador de las interacciones proteína-fármaco (la química de "llave y cerradura") permiten formarse una idea profunda sobre cómo actúan los fármacos a niveles atómico y molecular y ayudan considerablemente al diseño de moléculas activas. Se pueden estudiar con detalle los mecanismos que determinan el modo y la operación de reconocimiento de los fármacos frente a las proteínas con un ordenador que posibilita que los científicos vean qué forma y distribución de cargas debe tener la molécula visitante para encajar en el nicho de unión de la correspondiente proteína huésped. Esto significa que la estrategia habitual de tanteo o de búsqueda aleatoria puede mejorarse con la ayuda de sistemas computerizados.

## Síntesis Quiral

Una vez que una molécula se identifica como posible fármaco, los químicos

y los ingenieros químicos tienen que hallar el mejor modo de sintetizarla. El permanente desafío para los químicos es conseguir la síntesis selectiva, que de solamente el producto deseado y evite la formación de subproductos indeseables. La estereoselectividad y, en particular, la síntesis asimétrica, es un área fundamental debido a sus posibilidades para la producción de enantiómeros individuales (moléculas que

son imágenes especulares). Esto es especialmente importante en el caso de los compuestos bioactivos, ya que, con frecuencia, solamente uno de los enantiómeros presenta la actividad deseada. Dos de los principales enfoques en este campo son el empleo de catalizadores de metales de transición, portadores de

LA QUIMICA COMBINATORIA HA REVOLUCIONADO RECIENTEMENTE EL SISTEMA PARA EL DESCUBRIMIENTO DE NUEVOS FARMACOS AL PERMITIR LA SELECCION ENTRE UN ENORME NUMERO DE MOLÉCULAS.

***La tecnología ha abierto las puertas al análisis de la información genética y a la introducción de nuevos tipos de actividad en la información genética de un organismo. Los químicos, los bioquímicos y los biólogos moleculares están aportando nuevas técnicas de diseño para analizar, comprender y modificar con precisión la configuración genética de los organismos vivos.***

grupos coordinadores quirales y la aplicación de biotransformaciones en las que se utilizan las propias enzimas como catalizadores enantioselectivos. El empleo de anticuerpos catalíticos es también un área prometedora de actividad.

Los químicos, junto con los bioquímicos, han contribuido a conseguir notables progresos en muchos aspectos de las ciencias de la salud y de la vida. La síntesis y la producción industrial de estructuras moleculares muy complejas, como las hormonas esteroideas y sustancias análogas, para proporcionar agentes contraceptivos han tenido un gran impacto no solamente sobre la medicina, sino también sobre la sociedad. La síntesis química de péptidos y pequeñas proteínas es actualmente una técnica rutinaria automatizada que puede proporcionar péptidos en cantidades suficientes. Actualmente se producen con estos procedimientos algunos importantes péptidos fisiológicos para uso clínico, como por ejemplo, las hormonas peptídicas. Gracias a la síntesis química automatizada, podemos disponer hoy en día de fragmentos de ADN y ARN. Especialmente, los oligonucleótidos del tipo "sentido opuesto" (con la secuencia complementaria de un mensaje genético) pueden unirse selectivamente a la correspondiente secuencia de ADN o ARN con una elevada especificidad. Para los tratamientos de algunas enfermedades, desde infecciones vírales a trastornos genéticos, se cuenta ahora con moléculas que se han descubierto por medio de estas técnicas. Los oligosacáridos, que están asociados a factores de grupo sanguíneo, tienen aplicaciones en diagnóstico de la sangre y se preparan por síntesis química directa.

## TECNOLOGÍA GÉNICA

La tecnología génica ha abierto las puertas al análisis de la información genética y a la introducción de nuevos tipos de actividad en la información genética de un organismo. Los químicos, los bioquímicos y los biólogos moleculares están aportando nuevas técnicas de diseño para analizar, comprender y modificar con precisión la configuración genética de los organismos vivos. El trazado del mapa del genoma es también un gran desafío para el conocimiento y el tratamiento de los trastornos genéticos. La posibilidad de establecer la secuencia de las moléculas de ADN, la utilización de la reacción en cadena de la polimerasa (RCP) para amplificar pequeños segmentos de ADN, la modificación de segmentos anormales y el suministro y posterior inserción de estos segmentos en el material genético, ha abierto el camino a futuras terapias génicas. Esto ofrece grandes esperanzas a las personas que padecen enfermedades relacionadas con aspectos genéticos. La investigación genética nos ilustra más sobre las enfermedades hereditarias y situará la investigación farmacéutica sobre una base más racional. Se están desarrollando métodos con objetivos genéticos para tratar los puntos específicos en los que se desea intervenir.

## BIOTECNOLOGÍA

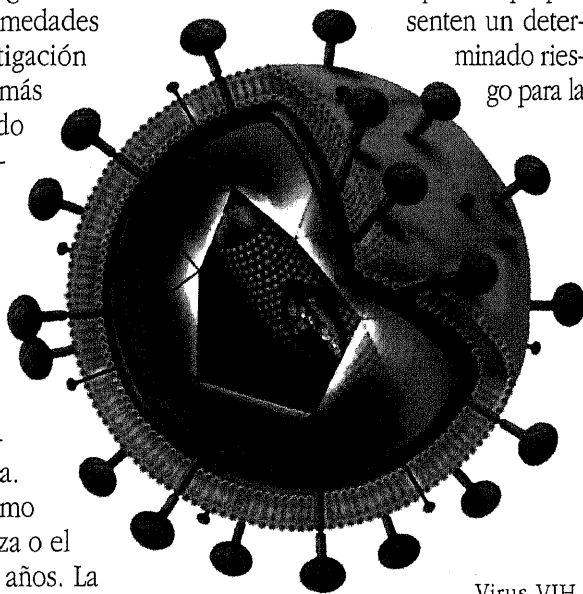
Los avances en tecnología genética han sido también muy provechosos para la biotecnología. La biotecnología tradicional, como la fabricación del pan, la cerveza o el queso, data de hacer miles de años. La nueva revolución biotecnológica comen-

zó hace 25 años con el dominio de la tecnología génica.

La Biotecnología Moderna se está extendiendo a una enorme variedad de campos. Los sistemas de selección basados en receptores clonados o en genes portadores de información se emplean en la búsqueda de nuevos candidatos a fármacos de mayor especificidad. Pueden construirse proteínas mutadas de mayor capacidad terapéutica o con mayores propiedades enzimáticas, y el diseño racional de proteínas es cada vez más viable debido a las nuevas y refinadas técnicas analíticas.

Las técnicas utilizadas en la moderna biotecnología van a impactar progresivamente sobre numerosos sectores industriales, incluidos los fármacos, las tecnologías medioambientales, la genética vegetal, la industria alimentaria y las industrias textil, del papel y del cuero. Se van a ver favorecidas la agricultura y la producción de alimentos, pero, sobre todo, la salud humana. Las sustancias que se extraen de fuentes naturales pueden contaminarse

con compuestos que presentan un determinado riesgo para la



Virus VIH

salud. La biotecnología permite evitar ese problema. La tecnología del ADN recombinante permite la producción de vacunas por procedimientos más nuevos y seguros y facilita la producción de fármacos y enzimas que contienen proteínas complejas. La producción de la hormona humana del crecimiento por ingeniería genética proporciona un producto desprovisto del prión que está presente en su fuente natural y que puede estar relacionado con las causas de la enfermedad de Creutzfeld-Jacob. Se pueden encontrar otros casos de este tipo, siendo uno especialmente importante el de la producción del factor VIII para la transfusión de sangre sin riesgo de infección por VIH.

La moderna biotecnología no es la varita mágica que curará el cáncer o eliminará el hambre en los países en vías de desarrollo, pero es una tecnología potente y eficaz que proporcionará nuevas formas para abordar problemas aún no resueltos. (Véase el capítulo "La conservación de nuestro planeta")

El crecimiento de la biotecnología en Europa se enfrenta a una serie de factores que dependen únicamente de la estructura y de las facilidades precisas para la inversión, la investigación y desarrollo, así como de la disponibilidad de mano de obra cualificada. La Biotecnología - al igual que todas las tecnologías prácticas -, suscita cuestiones relacionadas con los procesos y la seguridad y se precisan regulaciones razonables para su control. Pero más que cualquier otra tecnología innovadora, la biotecnología va a producir un impacto espectacular sobre las condiciones económicas y de la competitividad de Europa.

## **INSTRUMENTOS PARA LA MEDICINA**

Debido a los avances en instrumentación y técnicas analíticas logrados por químicos y físicos, los médicos tienen a su disposición métodos muy eficaces para el diagnóstico. Entre las técnicas de diagnóstico aún no generalizadas, están la formación de imágenes de resonancia magnética (IRM), que es una técnica derivada del desarrollo de la resonancia magnética nuclear que se utiliza en química estructural, la formación de imágenes Doppler, la tomografía con

fotones y positrones y las técnicas radiactivas. Los químicos han contribuido al desarrollo de estas técnicas diseñando y poniendo a punto productos químicos especiales, tales como los agentes de contraste para IRM y los radioisótopos para la tomografía con positrones.

Los progresos realizados en el análisis químico y bioquímico utilizando la cromatografía y la electroforesis han sido muy beneficiosos para los diagnósticos médicos. El desarrollo de sensores basados en procesos electroenzimáticos ha hecho posible la disponibilidad de pequeños analizadores portátiles de azúcar en sangre para los diabéticos. Esta tecnología de auto-diagnóstico, basada en la química y la bioquímica, se extenderá espectacularmente.

## **DISPOSITIVOS Y NUEVOS MATERIALES PARA LA MEDICINA**

Un aspecto importante de los últimos avances en las ciencias de los materiales durante las últimas décadas es el diseño y la síntesis de productos biocompatibles para miembros artificiales y mecanismos médicos. Se utilizan nuevas aleaciones, productos cerámicos, materiales compuestos, polímeros y plásticos estructurales especiales para sustituir o reparar articulaciones, cristalinicos, dientes, vasos sanguíneos, etc. El comportamiento de las prótesis e implantes quirúrgicos, especialmente para utilidades temporales (lo que requiere una biocompatibilidad y una biodegradación eventual benigna), está mejorando al emplearse combinaciones de materiales biológicos y sintéticos o mediante una modificación química de los polímeros biológicos. Los prometedores resultados de los polímeros perfluorohidrocarbonados como portadores de oxígeno sugieren que dentro de poco tiempo podrían emplearse temporalmente como sangre artificial.

El diseño de un fármaco eficaz no es sólo una cuestión de encontrar una molécula activa. La eficacia del fármaco depende de la capacidad de la molécula activa de alcanzar su objetivo en el organismo de forma eficiente y selectiva. Por lo tanto, es necesario diseñar una formulación protectora para el fármaco que le per-

mita atravesar las membranas protegiéndolo de su destrucción por metabolismo. Los químicos y farmacólogos han diseñado nuevos sistemas de administrar fármacos para resolver estos problemas. Algunos ejemplos son las microcápsulas, microsomas, liposomas, parches transdérmicos y la implantación directa de polímeros biodegradables que contienen el fármaco y que liberan lentamente la molécula activa.

## **QUIMICA AGRÍCOLA**

La Química ha colaborado de manera decisiva al desarrollo de la agricultura moderna. Entre los ejemplos que ilustran su contribución puedan citarse el diseño de moléculas biológicamente activas para los plaguicidas y herbicidas selectivos de baja toxicidad, la producción de fertilizantes para mejorar la calidad y el rendimiento de las cosechas y la ampliación del tiempo de almacenamiento y la estabilidad de los alimentos.

La invención y el desarrollo de nuevos productos químicos para su empleo como principios activos de plaguicidas y fungicidas es un importante avance actual. Las sustancias que se utilizaban antes eran eficaces para una determinada plaga u hongo específico, pero su actividad era demasiado persistente. Las nuevas investigaciones conducirán a sustancias que sean muy selectivas, activas a concentraciones muy bajas y que, después de su uso, se degraden rápidamente por la acción de los microorganismos del suelo sin perjudicar ni a los seres humanos ni al medio ambiente.

La naturaleza produce productos químicos en gran cantidad. Esto es evidente si se considera, por ejemplo, la producción de caña de azúcar de la que pueden extraerse hidratos de carbono (incluida la sacarosa). Las grasas y los aceites naturales (productos oleoquímicos) tienen un gran potencial ecológico como fuente de productos químicos para detergentes, cosméticos, lubricantes y polímeros biodegradables. Con el verosímil desarrollo innovador de la agricultura, se posibilitará la generación de fuentes de productos químicos para nuevas medicinas, polímeros y detergentes.

## LA CONSERVACION DE NUESTRO PLANETA

Los europeos esperan que el nivel de vida mejore continuamente, pero están cada vez más preocupados por el impacto medioambiental de la tecnología. La sociedad europea debe elegir modelos de crecimiento sostenible y no de consumo destructivo. La Química y la Ingeniería Química pueden ofrecer soluciones a esta aparente paradoja ya que están en condiciones de proporcionar tecnologías limpias y nuevos productos y, al mismo tiempo disponer de, los medios para hacer el seguimiento e interpretar la influencia de las actividades numerarias sobre el futuro de nuestro planeta.

### LA INDUSTRIA Y EL DESARROLLO SOSTENIBLE

En el futuro, la sociedad europea tendrá que confiar en un crecimiento sostenible más que en un consumo destructivo. La Química y la Ingeniería Química pueden ofrecer soluciones a la aparente paradoja de disponer de unas mayores expectativas de salud y riqueza mediante la tecnología y, simultáneamente, reducir la contaminación medioambiental resultante del empleo de esa misma tecnología. Estas dos disciplinas disponen, en realidad, de la capacidad efectiva de ofrecer tecnologías no agresivas que permiten seguir vías eficaces y compatibles con el medio ambiente para la fabricación de nuevos productos y, al mismo tiempo, aportar los medios necesarios para evaluar y controlar la influencia de los seres humanos sobre el planeta.

Para la industria Química, la idea fundamental en la que se basa el diseño de los procesos de fabricación sostenibles radica en el uso eficiente y racional de todos los recursos implicados en esos procesos. Las razones más importantes para adoptar y operar esta idea son:

- Los beneficios medioambientales debidos a la reducción de emisiones al agua y al aire, la menor cantidad de residuos a eliminar y la reducción del consumo de agua (que se emplea en procesos de calefacción/refrigeración).

- El uso prudente de los recursos en el caso de las materias limitadas, no renovables, como por ejemplo el petróleo y los minerales.
- Las ventajas económicas derivadas del ahorro de costes que permite que las compañías sigan siendo competitivas en los mercados mundiales.
- La demostración, por parte de la industria, a otros grupos interesados de la sociedad de una actitud responsable y cuidadosa frente al medio ambiente y los recursos del planeta.



Las cuestiones medioambientales con las que se enfrentan los ciudadanos de Europa requieren los cuatro siguientes enfoques:

- Análisis de lo que ya existe en el entorno (sustancias saludables e insalubres) y el seguimiento de sus efectos.
- Reparación de los daños causados al medio ambiente, incluida la conservación de nuestro patrimonio cultural.
- Prevención y reducción de la carga medioambiental, que deberá lograrse por medio del desarrollo de tecnologías inocuas y limpias, que ciertamente supondrán la mayor influencia a medio plazo.
- Aumento de la eficiencia de los procesos que consumen recursos, con un énfasis particular en el desarrollo y la naturaleza de futuras fuentes de energía.

Los escenarios que deberán recibir una atención principal serán la atmósfera (troposfera y estratosfera), las aguas (ríos,

estuarios y costas) y el suelo, así como la conservación de nuestros recursos justamente con su reciclado.

### CONTROL DEL MEDIO AMBIENTE

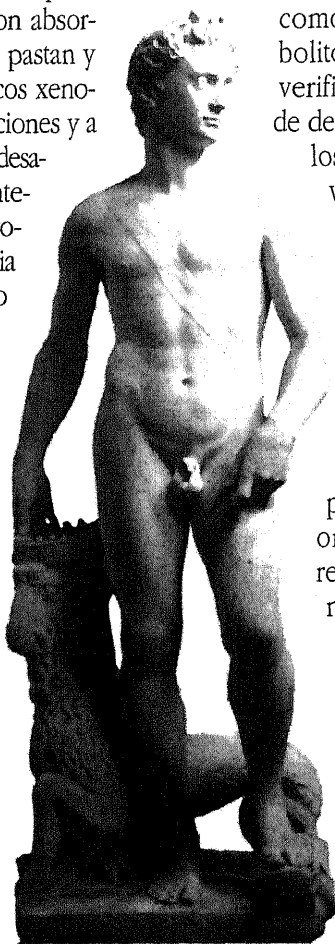
Hay dos cuestiones que requieren una investigación profunda: el análisis y el seguimiento cada vez más precisos de los contaminantes y el análisis y conocimiento de los efectos y destino final de los compuestos en el medio ambiente. La primera de ellas consiste en saber qué hay, dónde está, cuándo

hay exactamente y a donde va. Respecto a la segunda - la biodegradación-, necesitamos saber la velocidad y el modo con que cambia un determinado compuesto, qué es lo que se está formando a partir de él, qué efectos están produciendo estos subproductos, si constituyen un problema y, en ese

caso, qué importancia tiene y cómo se puede resolver. La evaluación del ciclo de vida de los productos naturales y artificiales va a ser cada vez más importante.

La investigación en el ámbito de los métodos analíticos requiere técnicas no destructivas de muestreo -cada vez más cuidadosas-, y el desarrollo y utilización de técnicas de espectrometría, difracción y resonancia magnética o electrónica. Estas actividades se llevan a cabo en colaboración con físicos e ingenieros. Junto con la disponibilidad de técnicas analíticas cada vez más sensibles, debe producirse el desarrollo de sensores cada más fiables para detectar contaminantes naturales y artificiales en el aire, el agua y el suelo y para el control en línea de procesos químicos y afines. Es necesaria una mejor modelización informatizada de la distribución de los compuestos en el medio ambiente y conocer la forma en que se distribuyen y transforman los contaminantes en el aire, en el agua, en el suelo y en las cadenas alimentarias.

tarias. Deben investigarse cada vez con mayor profundidad los efectos de los productos químicos sobre el medio ambiente. Necesitamos saber más sobre la forma en que los contaminantes atmosféricos se transfieren a las plantas, el grado en que los contaminantes del suelo son absorbidos por los animales que pastan y cómo los productos químicos xenobióticos afectan a las poblaciones y a los ecosistemas. Necesitamos desarrollar y validar modelos integrados eficaces sobre los procesos de entrada y transferencia de productos en el medio ambiente. La normalización de la estructura de los datos y los fundamentos del proceso de la evaluación - que debe incluir el examen de los límites del sistema, la ponderación de los factores que intervienen en el consumo de energía y materiales, la eliminación de residuos, la evaluación del ciclo de vida de los materiales y productos, etc.-, conducirán a un enfoque sistemático para evaluar el conjunto el impacto social de los productos químicos en el medio ambiente europeo.



los suelos, especialmente de los contaminantes orgánicos, tales como los componentes de los aceites minerales, hidrocarburos poliaromáticos y halogenados y los de los constituyentes sólidos orgánicos naturales, tales como los hongos y los metabolitos. Es esencial, asimismo, verificar exactamente el grado de descontaminación de los suelos y publicar una normativa internacional de procedimientos analíticos que incluya métodos de muestreo y de preparación de las muestras. La descontaminación puede realizarse inicialmente por inmovilización, como el secuestro de metales pesados o de materiales orgánicos tóxicos, lo que requiere la investigación de nuevos materiales poliméricos, y ciertas clases de vidrios, que sean, compatibles tanto con los materiales inmovilizados como con el medio ambiente. Obviamente será importante conocer bien los ciclos de vida de estos materiales inmovilizantes.

portamiento del ozono en la troposfera puede ser extremadamente indeseable, al producir la destrucción de la materia viva por oxidación, es vital sin embargo que este gas esté presente en la estratosfera, de manera que pueda cumplir su papel como interceptor de los rayos UV B, que son un potencial agente cancerígeno de la piel. Esta singular molécula es la protectora de la vida en la superficie de nuestro planeta y, aunque se creía que su química en la estratosfera se conocía bastante bien, las nuevas investigaciones han revelado que su comportamiento es más complicado de lo que se pensaba.

Por lo tanto, la investigación del comportamiento fotoquímico y dinámico de gases relativamente simples es vital para el conocimiento de la química de nuestra atmósfera y es de la máxima importancia para la supervivencia de la vida en este planeta. En este campo, en el que desempeñan un cierto papel muchas moléculas y iones de vida corta, la química teórica con ayuda de ordenadores puede ser una herramienta rentable para sustituir y complementar el difícil trabajo de laboratorio. Como en otras varias líneas de investigación, el desarrollo de programas diseñados para nuevos ordenadores de altas prestaciones es la clave para el éxito en la simulación de los procesos que rigen la química de la atmósfera.

## LIMPIEZA Y CONSERVACIÓN

La reparación del deterioro que ya se ha producido al medio ambiente requerirá un largo tiempo. La investigación que ha llevado a nuevas y mejores técnicas de limpieza va a permitir realizar económicamente reparaciones que hasta ahora han sido imposibles. Pueden identificarse tres actividades principales:

- Restauración directa, descontaminación y conservación del suelo.
- Gestión de residuos, agua de procesos, basura doméstica, fertilizantes y fangos de origen animal.
- Técnicas de medida y evaluación para controlar la eficacia de la restauración.

Es necesario investigar los procesos de degradación que tienen lugar en

## QUÍMICA DE LA ATMÓSFERA

La química de la atmósfera es extremadamente compleja y, aunque algunos aspectos son bastantes bien conocidos, continuamente están apareciendo nuevos hechos que modifican el entendimiento y, por lo tanto, la interpretación de lo que está sucediendo en la troposfera (la parte de la atmósfera más próxima a nosotros y, esencialmente, el aire que respiramos) y en la estratosfera. El ozono se encuentra, tanto en la troposfera, como en la estratosfera y es una molécula "Dr. Jekyll y Mr. Hyde". Constituido por tres átomos de oxígeno unidos entre sí, es un agente oxidante muy potente que también es capaz de capturar la perjudicial radiación ultravioleta procedente del sol. Mientras que el com-

## UNA QUÍMICA MÁS LIMPIA EN LOS PROCESOS INDUSTRIALES

¿Cómo estamos fabricando los productos químicos que necesitamos, sin producir al mismo tiempo subproductos desagradables e indeseables y sin dañar el medio ambiente ni agotar materiales que son irremplazables?

La búsqueda de productos menos dañinos para el medio ambiente que puedan sustituir a los disolventes que se utilizan ampliamente en la industria, es un desafío actual con el que se enfrentan los científicos universitarios e industriales. El dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) como fluido supercrítico es una interesante alternativa y puede utilizarse como disolvente en procesos de síntesis y extracción. Los fluidos super-

críticos son sustancias que no existen normalmente pero pueden crearse bajo ciertas combinaciones de presión y temperatura. En la actualidad, el CO<sub>2</sub> supercrítico se utiliza normalmente para la extracción de cafeína en la industria alimentaria y el aire supercrítico para la eliminación de los residuos tóxicos. Utilizando componentes o aditivos especiales, tales como detergentes o sacáridos, también es posible emplear agua, en lugar de disolventes orgánicos, como medio en el que tienen lugar determinadas reacciones. La investigación en el campo de las reacciones y procesos de oxidación está conduciendo al uso de oxígeno elemental, peróxido de hidrógeno y ozono como alternativas al cloro y otros agentes oxidantes clorados en los procesos industriales de blanqueo de pasta de papel. Para la purificación de productos, que es esencial en el control de calidad, se están desarrollando nuevos procesos de cristalización en sólidos fundidos que evitan por completo la necesidad de utilizar disolventes.

## EL RECICLADO

La protección del medio ambiente necesita nuevas técnicas para el tratamiento y la eliminación de residuos. Por otra parte, los recursos de la Tierra no son inagotables y, en algún momento, comenzarán a escasear. Debido a estos dos problemas la tecnología del reciclado se está convirtiendo en una prioridad creciente para la sociedad. Actualmente, se están reciclando algunos materiales como los metales y el papel, aunque todavía es necesario perfeccionar las correspondientes tecnologías. Los plásticos y los polímeros - por ejemplo - constituyen la base de numerosísimos materiales manufacturados pero, al final de su vida útil, se requiere la aplicación de nuevas tecnologías para su recuperación, reciclado y/o transformación en nuevos materiales o en energía. La elección del método de reciclado depende de la naturaleza del polímero. Empleando algunos procesos de la industria del petróleo, tales como el "cracking"

catalítico, el "hydro-cracking" y la hidrogenación catalítica, las poliolefinas (polietileno, poliestireno, etc) pueden transformarse en hidrocarburos ligeros que se pueden emplear como lubricantes o combustibles.

Los procesos de gasificación transforman las poliolefinas en una mezcla de hidrógeno y monóxido de carbono, que es un combustible industrial muy valioso. La despolimerización térmica rompe los residuos de material plástico para dar las moléculas constituyentes con las que se formaron (los monómeros). El proceso de quimiólisis está siendo utilizado para reconvertir los poliuretanos, las poliamidas y los poliésteres en sus correspondientes monómeros y la pureza y la calidad de los monómeros obtenidos por medio de estos procesos de reciclado son perfectamente adecuadas para la síntesis de nuevos polímeros.

## LA UTILIZACIÓN DE MATERIAS PRIMAS RENOVABLES

El empleo de grasas y aceites naturales, azúcares y almidón como materias primas en la industria química es, a la vez, un reto y una oportunidad. Es un reto porque no es fácil la integración de productos naturales, que frecuentemente, tienen composiciones muy complejas, en las líneas modernas de producción y transformación. Los procesos de producción están limitados muchas veces por consideraciones ecológicas y económicas, y tienen que producir productos que sean comercializables. Por otro lado es una oportunidad, porque la utilización de estos productos naturales, que son recursos renovables, puede considerarse como una contribución al desarrollo sostenible a largo plazo.

En el caso de los aceites naturales (que no proceden del petróleo), pueden esperarse, gracias a los modernos métodos de cultivo y a la tecnología génica, mejores materias primas para facilitar la transformación y el desarrollo de nuevos productos con propiedades completamente nuevas. En el caso de los azúcares, existe la oportu-

nidad de introducir nuevas aplicaciones en medicina y en la protección de las plantas, así como en productos cosméticos y en la fabricación de productos de química fina.

## LA CONSERVACIÓN DE NUESTRO PATRIMONIO CULTURAL

La conservación implica preservar la integridad de una obra de arte, ya sea un edificio, una estatua, un cuadro, muebles, cristalerías, vajillas de plata, joyería o tejidos. La operación puede requerir la restauración de partes pequeñas o grandes del objeto en cuestión, la estabilización de su color y textura y la protección de su superficie contra la corrosión, el desgaste físico, el calor y/o la luz excesiva.

La limpieza de objetos de arte requiere el uso de detergentes, ácidos, álcalis, agentes secuestrantes y disolventes orgánicos, productos que deben aplicarse al objeto con el menor efecto negativo posible. Consiguientemente, se necesita un conocimiento detallado de la naturaleza del material - su antig. Edad, sus constituyentes y el proceso de su fabricación -, junto con una gran experiencia en los procedimientos químicos de limpieza y en la subsiguiente estabilización de la superficie limpia. La protección de la piedra en edificios antiguos depende, no solo del conocimiento de los contaminantes atmosféricos locales y de las variaciones climáticas anuales, sino también de su comportamiento frente a los materiales empleados para su conservación. La restauración de objetos puede requerir adhesivos que unan las piezas originales, así como nuevas resinas para rellenar grietas, vidriados para cerámicas y pinturas para cuadros. Millones de libros en las bibliotecas de toda Europa están en peligro, deteriorándose lentamente debido a que el papel es naturalmente inestable al aire. Cada vez habrá más demanda de técnicas de conservación de fácil aplicación, que requerirán un mayor conocimiento de la química del papel y de las tintas de impresión y su comportamiento frente a los agentes empleados en la conservación.