

## ¿QUE FACEMOS COA QUÍMICA? A PERSPECTIVA DUN QUÍMICO

---

José M. Saá\*

Universitat de les Illes Balears

“tenho a certeza, mais a certeza é mentira  
ter certeza é não estar vendo”  
(F. Pessoa, *Poesía completa de Alberto Caieiro*)

Un certo ton pexorativo, imprecatorio ás veces, caracteriza as máis das impresións dos cidadáns sobre a química e, hai que supor, sobre os que a practican: os químicos. Frases como: “a química lixa”, “ese alimento, bebida... é química”, “os químicos contaminades o medio”, e outras máis duras, son extremadamente frecuentes hoxe en día. No subconsciente colectivo da cidadanía, a asociación de ideas química=contaminación=polución=en fermidade=morte calou profundamente e non será nada fácil de corrixir. Creo que é un erro agacharse, abrir o paraugas e pretender que non chove, pero, por outra parte, sen dúbida é un atrevemento que limita coa parvada pretender que o cidadán (incluso aquí ós químicos, eu mesmo) ha de asumir que o estado de cousas actual é o custo necesario dunha civilización avanzada, sen máis. O mar de fondo existe, é real. As accións colectivas da cidadanía exprésanse, cada día con máis empeño, ó esixir dos gobernantes locais,

nacionais ou supranacionais unha mellor calidade do medio. As accións individuais, testemuñais, coma a miña aquí, neste caso, non pode ser outra que informar. Con mellor ou peor fortuna, iso procurei a través de dous grandes apartados que pretenden plasmar de forma simple —¿e clara?, vostedes dirán— o papel do químico na sociedade.

### 1. ¿QUE FACEMOS OS QUÍMICOS?

---

#### 1.A. OS LÍMITES DO COÑECEMENTO E DA ACCIÓN: AS LEIS DA NATUREZA

---

Vivimos nun mundo cada vez máis tecnolóxico, claramente dominado polos principios da ciencia en todas as súas manifestacións. Comprender e manexar estes principios é unha necesidade evidente, simplemente para poder sobrevivir. Non nos debería ocorrer o mesmo có astronauta da canción de Elton John “Rocketman” que vive

\* Catedrático de Química Orgánica.

no espacio cinco días á semana e non se decata porque é un analfabeto científico (“and all this science I don’t understand; it is just my job five days a week”). Por outra parte, é preciso recoñecer que hai límites para o coñecemento alcanzable e as accións realizables, como expresa o Profesor Jesús Mosterín, catedrático de Lóxica e Filosofía da Ciencia da Universidade Autónoma de Barcelona nun artigo titulado “Los límites del conocimiento y de la acción. Óptimos imposibles”, publicado no *Boletín Informativo*, 292, agosto-setembro de 1999, da Fundación Juan March, e no libro *Ciencia viva*, do mesmo autor, editado por Espasa Calpe no ano 2001.

Contra a crenza idílica, ou utópica, dalgúñas persoas de que todo o desexable é posible (a actual civilización do “mando a distancia” adoita convencer os máis novos disto), Mosterín expón claramente os límites que a ciencia impón: hai opcións óptimas imposibles, hai situacións desexables simplemente irrealizables; dito de forma sinxela e rotunda: hai límites insuperables para o que podemos facer ou saber. Así, dispoñer de enerxía de fusión nuclear parece que pode ser un óptimo alcanzable xa que non hai nada que se opoña, coa excepción do formidable investimento de recursos que se require para financiar a investigación necesaria para desenvolvela. Está claro, sen embargo, que non podemos ter nunca un móbil perpetuo de primeira especie posto que viola os principios básicos que gobernan o

noso universo. É, sinxelamente, imposible. Pois ben, desde mediados do século XIX ata hoxe postuláronse unha serie de principios e probouse a validez dunha serie de teoremas de imposibilidade —algo así como os *stop* da ciencia— que lle poñen límites absolutos ó que podemos facer e, incluso, ó que podemos coñecer. Hai que ter claro que estes principios son limitantes, é dicir, tan só expoñen cómo non poden ser as cousas, pero non din nada acerca de cómo son ou serán. Estes teoremas da imposibilidade simplemente establecen unha serie de metas inalcanzables para a ciencia ou, incluso, para a sociedade. Así, as leis da termodinámica pónenlles límites ós tipos de interconversións materia-enerxía e anúnciannos que non poden existir nin móbiles de primeira nin móbiles de segunda especie; a teoría especial da relatividade ponlle límites á velocidade á que se pode mover a materia máisica e ó que podemos coñecer, xa que só poderemos ter acceso á información que está no noso “cono de luz pasado”; o principio da incerteza de Heisenberg ponlle límites á nosa capacidade de medir con precisión o que observamos, mentres o teorema da incompletude de Gödel anuncia que a teoría aritmética perfecta non pode existir; o teorema de Shannon establece que a canle perfecta de comunicación non pode existir e o teorema de Arrow ponlle límites á posibilidade de perfeccionar a democracia xa que o sistema de votación perfecto non pode existir. Soamente teremos a oportunidade de

tratar aqueles máis próximos á Química, como suxire o enunciado.

### 1.B. OBSERVABLES MACROSCÓPICOS: MATERIA E ENERXÍA

Situémonos agora no noso universo máis inmediato ¿como é o noso mundo? ¿de que está constituído? ¿por que é como é e non doutra forma? Sen dúbida, o mundo é así porque hai uns principios básicos, unhas leis fundamentais inmutables que gobernan o universo, o cal non está en contradición co indeterminismo, como nos ensina Popper (K. R. Popper, *El mundo abierto. Un argumento a favor del indeterminismo*, publicado pola Editorial Tecnos en 1986).

Utilizando a terminoloxía do Profesor J. Castells que tomei prestada do seu excelente libro *Química general*, publicado pola Editorial Alhambra en 1981, temos que recoñecer que habitamos un mundo no cal hai dous observables macroscópicos: materia e enerxía. Durante toda a historia do universo foi así. Coa materia temos unha relación sensual, é dicir, a través dos nosos sentidos detectámola, vémosla, tocámola, ulímola, oímola. Sen embargo, a enerxía, en si mesma, non é observable polos sentidos. Son observables os gradientes ou fluxos de enerxía: calor, son, velocidade, altura... Máis concretamente aínda, observamos que as cousas se moven, sentimos unha cambra de corrente eléctrica, notamos a calor, etc.

Todos fomos formando inconscientemente unha idea do mundo que

nos rodea, e, en particular, sobre a materia. Sen embargo, como xa se sinalou, non temos unha idea tan clara da enerxía e, por isto, temos certa dificultade para comprender e definir a enerxía sen caer no prototípico, pero acientífico: a enerxía... serve para... O que quizais xa non é evidente máis que para algúns é que materia e enerxía son, de acordo coa física post-Einstein, manifestacións dun mesmo fenómeno, xa que ambas están relacionadas entre si pola famosa ecuación  $E=mc^2$  de Einstein. Polo tanto, deberíamos tratalas a ambas como un único fenómeno. Sen embargo, aínda que só sexa por simplicidade, polo momento imos quedar coa visión da física clásica que manexa materia e enerxía como dous compoñentes distintos do mesmo fenómeno. Convén recalcar aquí que, aínda que a interconversión de materia en enerxía non corresponde a un observable diario ou frecuente na cortiza terrestre, porque non nos desprazamos a velocidades próximas á velocidade da luz, todos debemos ter presente na memoria que unha bomba atómica como as de Hiroshima e Nagasaki supón unha conversión violenta e practicamente instantánea de materia en enerxía.

### 1.C. MATERIA E ENERXÍA: CONSTITUCIÓN MICROSCÓMICA

Materia e enerxía son, pois, observables macrocósmicos pero teñen unha constitución microcósmica (dado que non somos directamente conscientes disto posto que eses constituíntes non son observables, esa

certeza haberá que adquirila a través do coñecemento). Formámonos unha idea do mundo material que nos rodea pero esta é unha idea sensual, é dicir, provén exclusivamente do que os nosos sentidos detectan; por exemplo, da información que nos dá a luz visible reflectida por esa materia, isto é, a única que recoñece e procesa o noso detector de luz visible (de lonxitudes de onda de, aproximadamente, 400 a 800 nm): o ollo. É dicir, a través dos nosos ollos vemos cores e contornos, pero nada máis. Non podemos saber qué é o que contén esa materia porque o noso detector non procesa a información doutras lonxitudes de onda. Sabemos que a materia ten unha constitución microscópica porque se irradiamos con luz —onda electromagnética— doutras lonxitudes de onda de maior enerxía como UV, Raios X... obtense unha resposta —a través dun detector específico— que, simplemente, corresponde á onda que enviamos restada na cantidade que se absorbeu. Desa información os científicos deduciron que a materia —e a enerxía— ten unha constitución microscópica. Por isto, dicimos que materia e enerxía son química e física, porque son manifestacións macroscópicas dun microcosmos constituído por moléculas, átomos e partículas máis pequenas —hadróns e leptóns— e, por outra parte, de fotóns e outras partículas. Materia e enerxía son, polo tanto, os obxectos de estudo da Química e a Física. A este respecto, é asombroso recoñecer que xa na antiga Grecia algúns intelectuais como Demócrito

de Abdera, que viviu no ano 370 a. C., tiñan perfectamente claro este concepto cando afirmaba: “o único que existe son átomos e espacio baleiro; todo o demais é mera opinión”. Este pensamento é sorprendente e asombroso, sobre todo porque procede dun razoamento inductivo e non da experiencia. É pertinente lembrar, en relación con isto, a frase de Max Planck: “experiments are the only means of knowledge at our disposal, the rest is poetry, imagination”.

#### 1.D. A QUÍMICA ESTUDIA E TRANSFORMA A MATERIA

O que facemos os químicos é fabricar produtos macroscópicos, observables, a través do manexo da súa constitución microscópica. Como calquera outra ciencia, para expresalo e transmitilo necesitamos unha linguaxe particular: a linguaxe da química. Así pois, algún que se preguntase para qué é necesario coñecer a estrutura microcómica da materia e representar a través de artificios —fórmulas químicas— a súa constitución química ten aquí a súa resposta obvia: simplemente para cambiala, dado que o obxectivo da química é facer materia. Mellor aínda: non é facer materia, senón transformar unha materia noutra (de acordo con “principio de conservación” de Lavoisier) conforme ás necesidades da sociedade. Así foi a través da historia: no medioevo os alquimistas querían converter a materia inútil —chumbo— na máis valiosa daquela, o ouro, naturalmente. Na actualidade o ouro non parece ser

particularmente útil para o benestar da sociedade, xa que non é máis ca un valor refuxio, en termos financeiros. Sen embargo, os nosos obxectivos actuais como químicos non cambiaron nin un chisco: queremos converter a materia noutras materias útiles, demandadas pola sociedade, polo mercado que está disposto a pagar por elas, xa sexan materiais superconductores, discos ópticos para a almacenaxe de información, fármacos anticancerixenos, etc. Por esta razón a Química seguirá existindo sempre porque ese obxectivo permanecerá no tempo. Malia isto terá que modificar a súa metodoloxía porque non é aceptable o empeoramento da calidade do medio que se produciu a consecuencia dun manexo inadecuado do binomio materia/enerxía.

Mencionouse xa que a comprensión da constitución microcómica da química, obviamente, necesita unha linguaxe: a linguaxe da química. Esa linguaxe é a información que pretendemos transmitirles os profesores ós alumnos. Temo que non me equivoque moito se afirmo que non o debemos facer moi ben, se nos atemos á dificultade que os alumnos adoitan ter para comprender a química, é dicir, a dificultade para falar esa linguaxe e para representar as “obras” derivadas desa linguaxe: as reaccións químicas. Non teño dúbida ningunha de que isto, polo menos en parte, se debe a que é moi difícil explicar a realidade macrocópica —a materia observable— de tamaño maior có centímetro, coa

axuda exclusiva dunha linguaxe que representa soamente os seus constituíntes microscópicos —átomos enlazados ou ligados, cun tamaño arredor dos anstrongs ( $1\text{Å}=10^{-8}$  cm). Fáltanos cubrir ese oco informativo que vai desde os  $10^{-8}$  cm ós cm —a química mesoscópica— onde actúan as forzas supramoleculares. Resulta sorprendente, case vergoñento, recoñecer que o noso coñecemento da química molecular —cun tamaño que oscila, xeralmente, entre os 2 e os  $10\text{Å}$ — é aceptablemente bo (dispoñemos dos saberes e dos medios axeitados para poder sintetizar calquera molécula deste tamaño), mentres que é escasísima a nosa capacidade para fabricar materia organizada mesoscópica con propiedades específicas. No momento presente comezamos a saber “manexar” materia do tamaño do nanómetro ( $10^{-7}$  cm). Así pois, este é un tema candente de investigación (a, así denominada, nanotecnoloxía) que, quizais nun futuro non moi afastado, permitirá cubrir ese *gap* informativo fundamental, capaz de explicar a materia observable mesoscópica coa linguaxe da química.

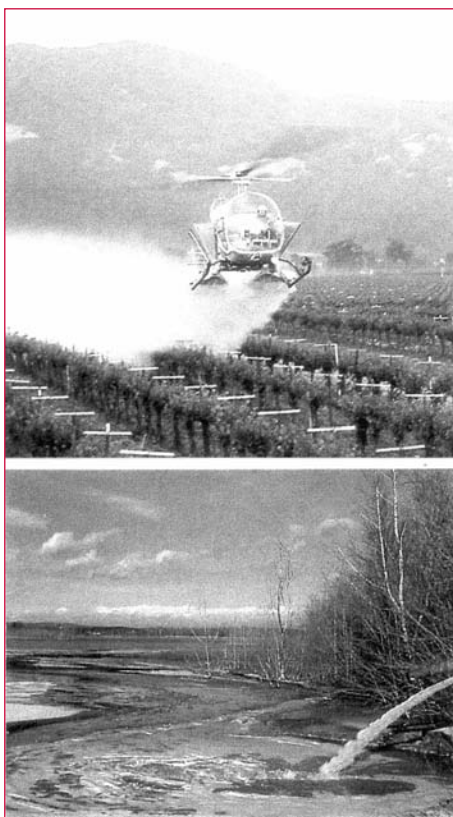
#### 1.E. OS QUÍMICOS SOMOS ENXEÑEIROUS MOLECULARES

As entidades microcómicas que compoñen toda a materia que nos rodea son agregados máis ou menos complexos de átomos ós que chamamos moléculas, que á súa vez se agregan en supramoléculas (algúns agregados supramoleculares teñen vida). Os químicos, no seu afán de xerar

materia nova útil, utilizan o que lles ofrece a natureza: materia e enerxía. O químico é, pois, un enxeñeiro molecular capaz de combinar sabiamente as moléculas e a enerxía para producir outra materia onde os átomos constituíntes sinxelamente están combinados de distinta maneira e teñen propiedades novas, útiles. Un dos conflitos importantes do mundo consumista actual é que neste proceso de manexo de materia e enerxía aparecen subproductos e materia e enerxía que, con frecuencia, non son inocuos. É dicir, o uso de materia e enerxía implica un custo non trivial. Sen dúbida se pode reducir considerablemente ese custo, pero hai, necesariamente, custo e márcao o segundo principio da termodinámica. De feito, as máquinas químicas máis perfectas que coñecemos no noso universo son os animais e as plantas, e estas nos seus procesos químicos empregan materia e enerxía, e producen refugallos que saen ó exterior. O máximo ó que debemos aspirar os químicos no proceso de fabricación —non confundir con creación— de materia é a conseguir a eficacia dos seres vivos. É absolutamente evidente que se ha de acadar máis eficacia no emprego de materia e enerxía para rebaixar o custo, ou, como o bautizou B. M. Trost, profesor de Química da Universidade de Standford en California, hai que “facer economía de átomos” (*Science*, 1991, 254, 1471; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 1995, 34, 259; B. M. Trost recibiu o premio Presidential Green Chemistry Challenge 1998 Academic Award pola

introducción deste concepto; véxase <http://www.epa.gov/opptintr/geenchemistry>). Volverei incidir sobre este tema máis adiante.

Vexamos pois o que un enxeñeiro molecular —un químico— é capaz de facer coa materia e enerxía que manexa, e as limitacións ás que está sometido.



Os subproductos de materia e enerxía utilizadas non sempre son inocuos. Fumigar as plantacións produce polución atmosférica e contaminación das zonas circundantes. Os verquidos ó río de substancias tóxicas poden chegar a varios países.

### 1.F. A LEI DE CONSERVACIÓN DA MATERIA

Proposta por Lavoisier no século XIX, a lei de conservación da materia (“a materia nin se crea nin se destrúe, só se transforma”) é tan evidente que non necesita discusión. Aparentemente, todo o mundo é quen de entender e aceptar a súa validez e aplicabilidade porque non é necesaria ningunha abstracción xa que, como se dixo, a materia é recoñecible polos nosos sentidos. Sen embargo, con inusitada frecuencia algúns esquecen o seu carácter universal e aceptan que políticos e vendedores empreguen argumentos que violan eses principios fundamentais. Non se pode admitir que nos medios de comunicación se afirme, por exemplo:

A empresa X inventou un método ecolóxico, non contaminante, para converter auga sucia procedente dos vertidos Y en auga potable, para o que se utilizará un método de osmose inversa.

Naturalmente, a osmose inversa non pode violar as leis da natureza. O primeiro principio fundamental, a lei de conservación da materia (Lavoisier), dinos que esta se pode transformar, que se pode converter pero que se debe conservar. Este principio insiste pois en que podemos facer química (neste caso separar os compoñentes químicos dunha mestura) pero non maxia (facer desaparecer os compoñentes). A empresa non nos explicou onde está a materia contaminante que levaba a auga. A osmose inversa seguramente permitirá separar a auga

pura da materia que levaba disolta. Pero non a fará desaparecer, senón todo o contrario: concentraría a e, polo tanto, aumentaría a súa perigosidade, o seu impacto ambiental por acumulación e, por conseguinte, a súa toxicidade (non se esqueza que a toxicidade non é máis ca un problema de concentración, diluír é diminuír a toxicidade e concentrar é aumentala). Así pois, o medio de comunicación debería manifestar:

A empresa X inventou un método anticolóxico, fortemente contaminante, para converter a auga sucia procedente dos vertidos Y en auga potable, para o que se utilizará un método de osmose inversa.

Outro exemplo aparecido recentemente nun medio de comunicación (*El País*, 31-05-00), aínda que certamente máis preciso có exemplo anterior, segue sendo, ó meu ver, insuficiente por enganoso: “Una bacteria con un gen de ratón limpia el cadmio en suelos contaminados”. No resumo afirmase: “la contaminación de suelos por metales pesados entra en vías de solución”; a bacteria “inmoviliza iones de cadmio consiguiendo que los efectos tóxicos de este metal pesado no dañe a las plantas”.

Obviamente, cando as bacterias morran o cadmio pasará de novo ó chan. Outra cousa diferente sería que o metabolismo bacteriano causase unha inertización do cadmio, xa sexa por oxidación, complexación... Neste caso, aínda que a materia se conserva, a toxicidade da especie química

concreta púidose reducir considerablemente. En efecto, a lectura detallada do texto —non así dos titulares— descobre que, en verdade: “la bacteria recombinante tiene la facultad de disminuir la toxicidad”.

Outro exemplo ben próximo á realidade, que nos afecta como cidadáns, é a incineración de residuos sólidos urbanos. Esta incineración produce abundantes residuos non volátiles como óxidos, carbonatos e outros sales metálicos cunha toxicidade que, no mellor dos casos, se reduciría. Sen embargo, o impacto ambiental por acumulación segue sendo enorme. ¿Que se fai con eles? A pregunta, malia ser simple, non ten unha resposta sinxela para ser tratada aquí.

#### 1.G. O PRIMEIRO PRINCIPIO DA TERMODINÁMICA

Dado que, no fondo, materia e enerxía son manifestacións macroscópicas dun mesmo fenómeno, ten que haber, tamén, un principio universal que proclame a conservación da enerxía. En efecto, o así denominado primeiro principio da termodinámica dinos que a enerxía non se destrúe nin se crea, só se transforma (Joule). Para aqueles non familiarizados, pódese dicir que a Termodinámica é unha parte da Física e da Química que nos permite analizar moitos fenómenos da realidade macroscópica cun estudio fenomenolóxico, isto é, en termos de variables macroscópicas medibles.

Dado que a enerxía non é recoñecible en si mesma, senón tan só o seu gradiente, é preciso detallar este principio algo máis. Enerxía é a capacidade de realizar traballo. Pódese realizar traballo químico, eléctrico, mecánico..., e isto é observable. Ademais, a experiencia demóstranos cada día que unha clase de traballo se pode converter noutro: o traballo eléctrico pódese converter en traballo térmico ou mecánico, o traballo químico en traballo térmico ou eléctrico, etc. Por conseguinte, non nos pode resultar estraño que as distintas formas de enerxía asociadas ó traballo se poidan tamén interconverter entre si. Sen embargo, estes intercambios están limitados en dous aspectos fundamentais: 1) a enerxía global ha de permanecer constante e, ademais, 2) a enerxía degrádase na súa calidade. Noutras palabras, o primeiro principio sinálanos que as distintas clases de enerxía (cinética, gravitatoria, electromagnética, térmica e máisica) que poden existir ligadas a unha determinada forma de materia, se poden interconverter entre si (a enerxía flúe dun sitio a outro, dun corpo a outro corpo). En realidade, son manifestacións dunha mesma enerxía, recoñecibles polos distintos sentidos e ás que lles puxemos nomes diferentes. Á enerxía asociada ó movemento chamámoslle enerxía cinética e á asociada ó campo gravitacional, ou a calquera outro campo, chamámoslle potencial; hai que advertir, ademais, que nesta análise se adoita ignorar deliberadamente a enerxía potencial máisica, isto é, aquela que, de acordo coa física



moderna post-Einstein, está ligada á masa e isto é así porque a conversión de masa en enerxía non é un observable da nosa vida diaria, é dicir, ou ben é moi lento —radioactividade natural de numerosos núcleos— ou está asociada a procesos que non comprendemos moi ben.

A enerxía, de calquera tipo, flúe dun corpo a outro cando o segundo corpo ten receptores apropiados para iso. A diferenza entre unhas formas e outras está en que unhas flúen con gran facilidade duns corpos a outros —a térmica, por exemplo— mentres outras —a electromagnética, por caso, que é onda e corpúsculo— soamente se poden transferir se o corpo ou partícula receptora dispón de receptores axeitados (dicimos, por isto, que a enerxía está cuantizada ou, o que é o mesmo, que é descontinua).

Para a correcta interpretación e expresión do segundo principio da termodinámica, é conveniente definir a enerxía dun sistema como:

$$E=W+Q$$

onde  $W$  = traballo e  $Q$  = calor

e ha de quedar claro que enerxía é a capacidade de producir traballo pero tamén hai que entender que na realización deste traballo parte da enerxía se transforma en calor que se transmite ós arredores (a frase bíblica “comerás o pan coa suor da túa fronte” é o referente máis directo do segundo principio).

A primeira lei da termodinámica dinos que a enerxía se conserva. Polo tanto, non pode haber móbiles de primeira especie, é dicir motores ou sistemas que subministren traballo mecánico —ou doutro tipo— indefinidamente sen achega de enerxía —sen consumo de combustible. A segunda lei da termodinámica dinos que a enerxía se degrada xa que a entropía aumenta en todos os procesos irreversibles (o concepto de proceso irreversible é fundamental para interpretar correctamente o concepto de entropía, habitualmente aceptado, de forma incorrecta, como a tendencia á desorde, sen máis; insisto, non hai tendencia á desorde *per se*, soamente cando ten lugar un proceso irreversible de intercambio de enerxía). Ademais, é imposible converter calor en traballo (Kelvin). Non é factible un proceso no que unicamente se transfira enerxía dun corpo frío a outro máis quente (Clausius) e, polo tanto, non pode haber móbiles de segunda especie.

#### 1.H. ¿EN QUE DIRECCIÓN SE INTERCAMBIA, FLÚE, A ENERXÍA? O SEGUNDO PRINCIPIO DA TERMODINÁMICA

O segundo principio da termodinámica deriva do concepto de entropía de Clausius (1865), a cal se pode definir como aquela parte da enerxía interna dun corpo que non é accesible para propósitos prácticos, é dicir, para intercambios de enerxía (J. Castells, *Química General*, Madrid, Alhambra, 1981).

A enerxía dun sistema determinado pode fluír dun sistema a outro ou ós arredores. O primeiro principio da termodinámica non é máis ca un sistema de contabilización de enerxía e, por isto, establece que, con tal de que o balance final sexa cero, é indistinto que a enerxía resida no propio sistema ou nos arredores. Cando ocorre un cambio, un suceso, todo o universo do suceso, o propio sistema e os seus arredores quedan afectados, pero a enerxía global mantense constante, é dicir, nin se crea nin se destrúe. Isto quere dicir que o universo real que poboamos sempre tivo, e sempre terá, a mesma enerxía global  $E$ , aínda que, iso si, un dos seus compoñentes  $W$  diminúa (o traballo útil diminúa) mentres o compoñente  $Q$  aumenta (a entropía aumenta).

Así pois, a pesar de toda esta aparente inmutabilidade que parece derivarse dos principios de conservación de materia e enerxía, o universo que habitamos cambia constantemente, e materia e enerxía distribúense de forma non homoxénea no universo global e tamén no universo observable do noso mundo diario. A contradición aparente —que non é tal— é que no noso universo coexisten agrupacións supramoleculares —nós mesmos, seres vivos— capaces de captar enerxía de forma relativamente eficaz, mentres outras —a materia inorgánica— non posúen esa capacidade.

Sen embargo, ningún destes principios nos di nada acerca da predictibilidade dun determinado suceso

ou cambio. Por conseguinte, é válido facerse a pregunta: ¿en que dirección teñen lugar os cambios de enerxía? A predictibilidade dun feito, entendido como intercambio enerxético irreversible, non está, pois, determinada polo primeiro principio da termodinámica senón que vén determinado polo segundo principio da termodinámica. Este pódese establecer en termos de probabilidade estatística: en calquera universo, suposto que dispoñemos do tempo  $t$  necesario, cúmprense as leis da probabilidade ou, o que é o mesmo, dado un certo universo nun estado inicial, e suposto o tempo necesario para que evolucione, ocorrerá o suceso que conduza a un estado final que sexa o máis probable entre todos os estados finais posibles. Pode formularse máis brevemente, aínda que dun xeito máis críptico, a través dalgunha das seguintes definicións: a entropía do universo tende a aumentar ou, mellor, a tendencia da enerxía útil para facer traballo tende a diminuír. Ó meu ver, por perceptible, a definición máis intuitiva é: a enerxía degrádase e, polo tanto, a enerxía útil para facer traballo tende a diminuír.

Esta última definición, que fai mención ó carácter decrecente do traballo útil, é moi clara xa que ó ser  $E=W+Q$ , e  $Q$  moi difícil —custoso— de transformar en  $W$  —porque  $Q$  é unha forma de enerxía practicamente continua que se perde con facilidade pois se transmite a calquera outro corpo máis frío (é conveniente neste sentido lembrar que a temperatura

media do noso universo é de preto dos  $3^{\circ}\text{K}$ —, dedúcese que o fluxo de enerxía irá sempre na dirección de maior  $Q$  ou menor  $W$ . Polo tanto, o segundo principio pódese relacionar coa maior probabilidade de fluxo de enerxía.

Desde o punto de vista das leis da probabilidade estatística, dado que o estado máis probable é aquel ó que lle corresponde un maior número de estados accesibles, o segundo principio da termodinámica dinos que o universo evoluciona sempre no sentido que conduce a un maior número de estados accesibles. A entropía é a variable física que determina o número de estados accesibles. Pódese expresar de forma máis precisa como o logaritmo neperiano do número de estados accesibles.

Vexamos algúns exemplos macroscópicos observables. Todos sabemos predicir o que ocorrerá nunha serie de exemplos coma os que seguen. Exemplo 1) supoñamos unha bóla sostida cos nosos dedos no aire; en canto abramos os dedos sabemos o que vai ocorrer: caerá ó chan; aceptamos por certo tamén que o proceso non ocorrerá en sentido inverso ou que o sistema permanecerá como estaba ó principio. Exemplo 2) podemos predicir que non ocorrerá o proceso inverso ó que tivo lugar cando un ovo cae ó chan e se esmaga. Exemplo 3) somos capaces de afirmar con rotundidade que unha vez que unha acha ardeu, o proceso inverso de reconversión das cinzas no tronco e aire primitivos, non ocorrerá. Exemplo 4) temos por certo que ó xuntar —ou

mesturar, se iso é posible— un obxecto quente cun frío terá lugar unha transferencia de calor desde o corpo quente ó frío pero non á inversa. Exemplo 5) sabemos, así mesmo, que dous obxectos perfectamente illados á mesma temperatura permanecerán á mesma temperatura indefinidamente ou, o que é o mesmo, dicimos que están en equilibrio. Exemplo 6) estamos completamente seguros de que se disolvemos sal común en auga o sal nunca se concentrará nun punto da disolución senón que tenderá a formar unha disolución de concentración homoxénea.

Sen dúbida, estas prediccións refírense a intercambios de enerxía observables na nosa experiencia cotiá pero, naturalmente, a serie de exemplos pódese levar á escala microscópica de átomos e moléculas e, por suposto, tamén á escala galáctica.

Podemos comprender agora que, realmente, o primeiro principio, ou principio de conservación da enerxía, non nos di nada acerca da predictibilidade deses intercambios ou fluxos enerxéticos que acabamos de describir. Elixamos o exemplo da bóla sostida cos nosos dedos no aire. En canto abrimos os dedos sabemos que cae ó chan. O que de feito ocorre é que, cando cae, se produce calor ou, mellor dito, a enerxía gravitacional da bóla convértese en enerxía térmica pero, globalmente, segundo o primeiro principio, a enerxía tívose que manter constante: soamente se puido interconverter noutra enerxía e en calor. O realmente importante é recoñecer que o primeiro principio

seguiría cumpríndose incluso se o proceso tivese lugar á inversa, é dicir, se a bóla subise desde o chan e os arredores se arrefriasen. Polo tanto non é o primeiro principio o que define a verosimilitude do proceso. En realidade, é o segundo principio o que nos define a dirección na que ocorrerá e, polo tanto, o que marca a denominada frecha do tempo. Adóitase dicir en termos pouco precisos: si, cae pola acción da forza de atracción da terra; ou tal vez: si, cae porque os sistemas tenden a diminuír a enerxía potencial. Realmente estes argumentos son simples descrições, pero, desde logo, non hai aquí unha análise científica rigorosa. A explicación termodinámica correcta sería:

a) A bóla cae porque desta maneira aumenta a entropía do universo e a entropía do universo aumenta porque aumenta a entropía dos arredores xa que aumenta a súa enerxía térmica.

b) A enerxía térmica dos arredores aumentou a consecuencia e á custa da diminución da enerxía potencial gravitatoria da bóla, que pasa dunha posición inicial a outra final de nivel inferior. A enerxía do universo, lembrese, non se modifica.

Debe quedar claro, pois, que a bóla non ten ningunha tendencia a diminuír a súa enerxía potencial. Ocorre porque, desta forma, aumenta a enerxía dos arredores (*b*) e, polo tanto, aumenta a entropía do universo (*a*). Aínda recoñecendo estas precisións,

con frecuencia resulta útil describir a forza da atracción gravitatoria que ten unha expresión na que se inclúe o sentido da forza, un vector. Pero, non o esquezamos, a forza gravitatoria non é a causa senón, simplemente, unha explicación; o sentido da forza non é a causa última senón a consecuencia da convección de signos adoptada na definición.

Así pois, os cambios antes citados poderíanse utilizar para realizar un traballo, dado que o estado inicial tiña unha certa enerxía. Unha vez realizado ese cambio, o sistema perdeu parte da capacidade de realizar traballo xa que, simultaneamente, lle transferiu calor ó universo. Abreviadamente adóitase dicir que proceso ocorre porque desta maneira aumentou a entropía do universo.

En resumo, tivemos ocasión de ver que habitamos un universo gobernado por unhas leis inescapables, isto é, de carácter xeral, universal, ás que denominamos leis da natureza, que determinan a configuración dese universo poboado por materia e enerxía que pode fluír dun sitio a outro, dun corpo a outro. Os químicos —enxeñeiros moleculares— son capaces de fabricar materia nova a partir doutra materia e enerxía, modificando para iso a súa constitución microcómica. Nestes procesos, necesariamente, produciranse refugallos de materia e enerxía. De aí a pregunta seguinte.

## 2. ¿QUE FACEMOS COA QUÍMICA?

“como nunca podemos tener todos los datos de una cuestión, nunca podemos resolverla”

F. Pessoa, *Libro del desasosiego de Bernardo Soares*

### 2.A. INTERCAMBIOS DE MATERIA E ENERXÍA UNIVERSAIS E LOCAIS

De todo o dito dedúcese que, se fose posible situarse fóra do universo como un observador inmóbil veríamos que, globalmente, non ocorre nada (enerxía e materia permanecen invariables, aínda que se intercambien constantemente entre un corpo e outro a nivel local), todo permanece constante, só pasa o tempo  $t$  do máximo de entropía, e non ó revés. Por iso se fala da, así denominada, frecha do tempo (J. Maddox, *Lo que queda por descubrir*, publicado pola Editorial Debate en 1999).

Sen embargo, se observamos o universo inmediato, os nosos arredores, recoñecemos que todo o que ocorre no noso contorno son intercambios de materia e enerxía. Algúns destes cambios descubrímoslos como naturais porque son repetitivos, predicibles, e os seus custos asumidos resignadamente. Exemplos evidentes son o fluír dun río cara ó mar, ou os estacionais como a caída das follas das árbores no outono, a fusión do xeo no verán, mentres outros son circunstanciais, como os raios que caen durante a tormenta, etc.; todos eles implican un intercambio de materia/enerxía co

noso medio e aceptámoslos sen máis pola simple razón de que cremos que, por naturais, son inalterables. Estes cambios que definimos como naturais son asumidos como tales e con isto entendemos e aceptamos que o noso universo máis inmediato, a Terra, permanece nun equilibrio estable. En resumo, os cambios denominados naturais, sacando excepcións, témolos por bos ou, se se prefire, por asumibles. Outros intercambios do binomio materia/enerxía son os inducidos pola actividade humana diaria que produce cousas materiais novas constantemente: queimamos combustible para locomoción, facemos papel, fabricamos polímeros para vestirmos ou enviamos unha mensaxe de correo electrónico a través do ordenador. Todo o observable ó noso redor son transformacións de materia e enerxía que, malia que en conxunto non supoñan variación ningunha, teñen lugar nunha determinada dirección, aquela que marca o aumento da entropía do universo. Fixémonos, sen embargo, en que esta actividade humana de produción de materia nova pode xerar un conflito serio se se alteran ou modifican os ciclos de recuperación natural dos átomos que compoñen a materia, fundamentalmente C, N, P..., e se se alteran ou modifican os fluxos naturais de enerxía (os máis inmediatos marcados ou definidos nos fenómenos meteorolóxicos). Dito noutras palabras, o conflito aparece cando a actividade humana se converte nunha poderosa forza da natureza e adquire capacidade para modificar aqueles

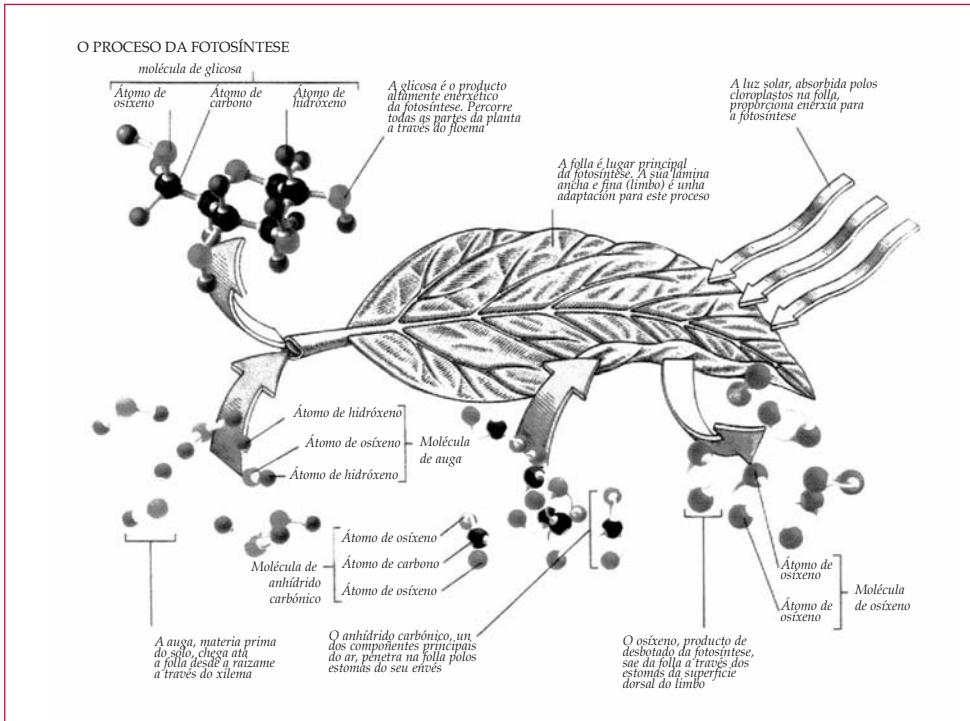
intercambios que definimos como naturais, alterando o equilibrio natural. Este parece ser o estado actual do noso universo máis inmediato, a Terra.

## 2.B. INTERCONVERSIÓNS MATERIA/MATERIA, ENERXÍA/ENERXÍA, MATERIA/ENERXÍA E ENERXÍA/MATERIA

Aínda que a nivel cosmolóxico a clasificación dos observables microscópicos en materia e enerxía é puramente formal, é conveniente manter esta división porque axuda a comprender os principios subseguintes ó nivel máis inmediato do local. De feito, as leis de conservación da materia e da enerxía deberíamos unificalas desde un punto de vista cosmolóxico nunha única: “o binomio da materia/enerxía non se crea nin se destrúe, só se transforma”. Sen embargo, é conveniente seguir mantendo a división clásica para, así, facilitar a comprensión e recoñecer mellor os intercambios de materia e enerxía que nos rodean, é dicir, desde un punto de vista local. En efecto, de inmediato resulta evidente que a materia se pode converter en enerxía e a enerxía se pode converter en materia. Iso é o que conseguimos os químicos, os biólogos ou os físicos, pero tamén se pode converter materia en materia e enerxía en enerxía. Para comprender estes intercambios necesitamos manexar algúns detalles superficiais da materia, pero detalles, á fin e ó cabo, microcósmicos da materia.

Algunhas das interconversións materia/materia convencionais son

obvias e non necesitan comentario ningún. Moitas delas son simples modelacións da materia, desde o labor dun fabricante de zapatos ó dun arquitecto, un escultor, un oleiro, un carpinteiro ou un dentista, é dicir, cambian de forma, de cor, de aspecto a materia —cambian o macroscópico— pero non cambian a súa constitución. Naturalmente, estes procesos producen refugallos, pero o equilibrio terrestre non se resente porque a reciclaxe natural destes desperdicios é fácil. Outras interconversións materia/materia, pola contra, modifican a constitución da materia mesma: desde as plantas que producen algodón, mazás ou, sinxelamente, madeira, ós químicos fabricantes dun fármaco con propiedades antibióticas, pasando polos físicos deseñadores dun disco óptico de almacenaxe de datos ou os biólogos que modifican un xene. Transformar materia significa soamente, non o esquezamos, reordenar os seus compoñentes básicos (moléculas, átomos, electróns) e, polo tanto, nestas operacións producen, necesariamente, refugallos. Estas interconversións materia/materia, así como as conversións de materia en enerxía e viceversa (enerxía máisica, segundo J. Castells), necesitarían dunha análise máis coidadosa e detallada. Para facelo necesitaríamos entrar no microcósmico: o átomo e os seus constituíntes elementais. Protóns, neutróns e electróns —hadróns e leptóns en terminoloxía máis actual— constitúen os ingredientes básicos para esta interpretación microscópica simplificada



O laboratorio natural das plantas aproveita ata un 30% a enerxía lumínica. A súa eficacia está moi por enriba do que pode acadar o home hoxendia coas súas células fotovoltaicas. Tomado da *Enciclopedia visual de los seres vivos*, Altea, El País, 1993.

da materia. Un dos obxectivos da licenciatura de Química é precisamente afondar nisto.

Por outra parte, as interconversións de enerxía en enerxía do mesmo tipo entre dous corpos xeralmente teñen que ver coa emisión de radiación electromagnética (e a súa correspondente partícula, o fotón, que non ten masa e, polo tanto, viaxa á velocidade da luz; non se esqueza que radiación electromagnética é onda e partícula) e a súa recepción por outro

corpo. A enerxía electromagnética está cuantificada, é dicir, a cantidade de enerxía absorbida ou emitida non é continua senón descontinua (intercámbianse cuantos ou paquetes discretos de enerxía) dado que se debe corresponder á diferenza de enerxía de dous estados posibles da materia, xa sexan vibracionais, rotacionais, electrónicos ou nucleares. Por outra parte, as conversións dunha enerxía —electromagnética, por exemplo— noutra —elétrica, química, ou doutro

tipo— dentro dun mesmo corpo necesitan, ademais, dun mecanismo convertedor —transductor— eficaz —canto máis eficaz mellor— posto que a enerxía que se perde nestes intercambios é sinxelamente calor (Q) e este é dificilmente recuperable, pois soamente é convertible —en parte— en enerxía cinética (a pesar disto gran parte da enerxía eléctrica que consumimos deriva, en último termo, desta conversión de calor en enerxía cinética). Incluso a absorción/emisión de enerxía electromagnética supón perdas de enerxía porque no proceso se poboarán e despoboarán estados vibracionais (na práctica é como se fose enerxía continua posto que calquera corpo sólido, líquido ou gasoso posúe niveis vibracionais axeitados para aceptar esta enerxía). A clave da eficacia dos vexetais está en que dispoñen dun mecanismo convertedor de aproveitamento de  $h\nu$  en enerxía química (ATP). Aínda que só se aproveita aproximadamente o 30% da enerxía lumínica, esta é unha eficacia practicamente inigualable se nos atemos ó nivel de eficacia moi pobre ( $\ll 5\%$ ) que se acadou coa captación de enerxía por parte das células fotovoltaicas actuais.

## 2.C. O ANTROPOCENO

Tal e como describe Carl Sagan (*Cosmos*, publicado pola Editorial Planeta en 1982), a evolución do universo ocorreu de maneira lenta pero constante, de acordo co vector que marca a frecha do tempo (véxase

Stephen W. Hawking en *Historia del tiempo*, publicado pola Editorial Crítica en 1988). Temos constancia de que ó longo do tempo se produciron cataclismos climáticos —por exemplo as glaciacións— e cosmolóxicos —coma os meteoritos— monstruosos que afectaron a vida do planeta (con cambios notables na esfera do cosmolóxico e incluso coa desaparición efectiva das especies). Por certo, estes accidentes colosais seguímolos chamando naturais, posiblemente porque o home non os puido controlar e non tivo nada que ver neles e, consecuentemente, asumíunos pasivamente. En calquera caso, o transcendente é que estes cambios se produciron nun lapso temporal moi longo e a readaptación do sistema terrestre a eles ocorreu tamén nun período de tempo grande. Daquela, o home era un simple observador. Actualmente, sen embargo, é un actor a escala universal. De aí que, por proposta de Paul Crutzen (profesor de Química Atmosférica do Instituto Max Planck e Premio Nobel de Química en 1995), se denominase a nosa era a era do Antropoceno.

Se nos circunscribimos á historia recente da Humanidade —os dous mil anos da era cristiá— observaremos que durante os primeiros 1900 anos o home a penas lograra avances científicos significativos no dominio da ciencia e, por conseguinte, no dominio da materia e a enerxía. Todos os acontecementos eran considerados naturais. Nin que dicir ten: durante este período a Humanidade foi moi vulnerable ás



grandes catástrofes —denominadas naturais— e foi decimada en múltiples ocasións por enfermidades como a peste, a varíola ou a tuberculose, tamén consideradas naturais e, polo tanto, aceptadas estoicamente pola Humanidade. Sen embargo, nos últimos cen ou douscentos anos os humanos logramos avances extraordinarios en numerosas áreas científicas, todas elas relacionadas cos intercambios de materia e enerxía dos que estivemos falando. Dominamos moitísimas enfermidades das consideradas epidemias ou pandemias, comézanse a dominar os mecanismos de reprodución celular, coñécese o xenoma humano (2000) e perséguese, xa, o proteoma. Dominamos, polo menos en parte, o núcleo atómico e somos quen de producir enerxía de orixe nuclear. Ademais, tamén conseguimos enerxía doutros medios. Fabricamos materiais diversos (desde polímeros para o vestido, materiais soporte de información —en papel, fotográfica, dixital...— materiais para o transporte, medicinas, etc.), e todo isto influíu de forma determinante na nosa calidade de vida, se mida esta co criterio co que se mida (xa sexa en termos de incremento da vida media das persoas, de coñecemento ou información dos cidadáns do mundo ou de produto interior bruto dos distintos países). Moi pouca xente querría volver ó nivel de vida dos nosos avós ou tataravós. En resumo, nestes últimos douscentos anos multiplicamos enormemente os procesos de intercambio de materia/enerxía, froito do cal é o enorme incremento na

calidade de vida. Lembremos, a este respecto, que definimos  $E=W+Q$ , onde  $E$  é a enerxía total,  $W$  a enerxía útil ou enerxía convertible en traballo —nas realizacións humanas sinaladas anteriormente— e  $Q$  a enerxía que, necesariamente, se perde en forma de calor. Así pois, parte da enerxía total consumida non puido ser aproveitada e flúe ó universo en forma de calor (é dicir, aumenta a entropía do universo, tal como esixe o segundo principio da termodinámica). Noutras palabras, estes grandes avances non se conseguiron sen custo ningún. Mais ben ó contrario: como consecuencia desa enorme actividade humana de intercambio materia/enerxía, neste momento temos sobre a mesa un conflito ambiental que supera as barreiras do nacional para se converter en global. O conflito é importante por ser universal e por se deber, non a catástrofes naturais senón á nosa propia actividade e, tamén, porque os cambios que se están producindo ocorreron nun período de tempo moi curto. A proposta de Paul Crutzen (Premio Nobel en 1995 pola súa contribución ó coñecemento da produción e destrución do ozono estratosférico) de denominar a esta era como a era do Antropoceno é, polo tanto, pertinente e axeitada.

En concordancia co nome proposto pódese afirmar rotundamente que os humanos nos constituímos nunha forza da natureza que coa súa acción provocou, ou é capaz de provocar, auténticos cambios cataclísmicos

(no sentido de universais, de forza da natureza) que moitos entenden que modifican perigosamente o fráxil equilibrio daquilo que afecta ós principios da vida das especies no planeta Terra.

O século XXI foi bautizado por algúns como o do Medio (as carreiras universitarias con estes contidos florecen por todas partes). Na, aínda recente, conferencia plenaria dirixida ós membros da AAAS e despois aparecida en *Science*, 1998, 279, 491, a autora Jane Lubchenco é bastante suxestiva ó afirmar que entramos no século do medio: “Entering the century of the environment: a new social contract for science”. O argumento central desta disertación é que os humanos nos convertemos noutra forza da natureza moi poderosa e moi perigosa para a propia supervivencia dos seres vivos no noso planeta, posto que a súa acción está modificando os sistemas físicos, químicos e biolóxicos de forma extensa, profunda e, todo isto, moi rapidamente. Esta nova forza vén inducida por tres grandes causas directamente relacionadas co consumo de recursos: o aumento da poboación, a diminución de recursos vitais e o consumismo do sistema económico da sociedade. As consecuencias son ben coñecidas:

1) Entre 1/3 e 1/5 da superficie terrestre está sendo transformada e a metade da auga accesible é utilizada xa pola Humanidade;

2) modificáronse considerablemente os ciclos do carbono (producimos un 30% máis de CO<sub>2</sub> cá principios do século) e do nitróxeno (a actividade humana fixa máis nitróxeno có resto das especies terrestres);

3) producíronse modificacións das poboacións de seres vivos (fundamentalmente paxaros e peixes).

Na entrada do novo milenio caracterizado por un sistema económico definido pola globalización e a competencia, que esixen un uso indiscriminado do binomio materia/enerxía para producir novos bens de consumo, parece oportuno reexaminar os custos dun desenvolvemento tan rápido e, se acaso, propoñer accións. O razoamento lévanos inevitablemente a examinar solucións de ámbito planetario posto que o problema é planetario e, polo tanto, político: despois da Conferencia de Montreal na que se lle puxo couto á emisión de gases destructores da capa de ozono, comezouse a actuar no recorte das emisións de gases —e outras substancias— inductores do denominado efecto de invernadoiro. Desafortunadamente, os acordos establecidos na conferencia de Kyoto de 1997 non se concretaron, aínda, nun plan aceptado por todos os países do mundo.

Os cambios físicos, químicos e biolóxicos mencionados proveñen das alteracións no funcionamento do equilibrio planetario que se induciron pola alteración dos ritmos de reciclación dos, así chamados, ciclos de carbono,

nitróxeno e posiblemente outros elementos. Dado que consumimos recursos —materia e enerxía— a gran velocidade, producimos refugallos —materia e enerxía— que o sistema terrestre é incapaz de reciclar ó mesmo ritmo que se consomen. A capacidade do sistema terrestre —como un todo— para responder a estas esixencias na velocidade de reciclaxe é un tema de enorme transcendencia —de política universal— e, á vez, un problema dos cidadáns, de cada un dos cidadáns.

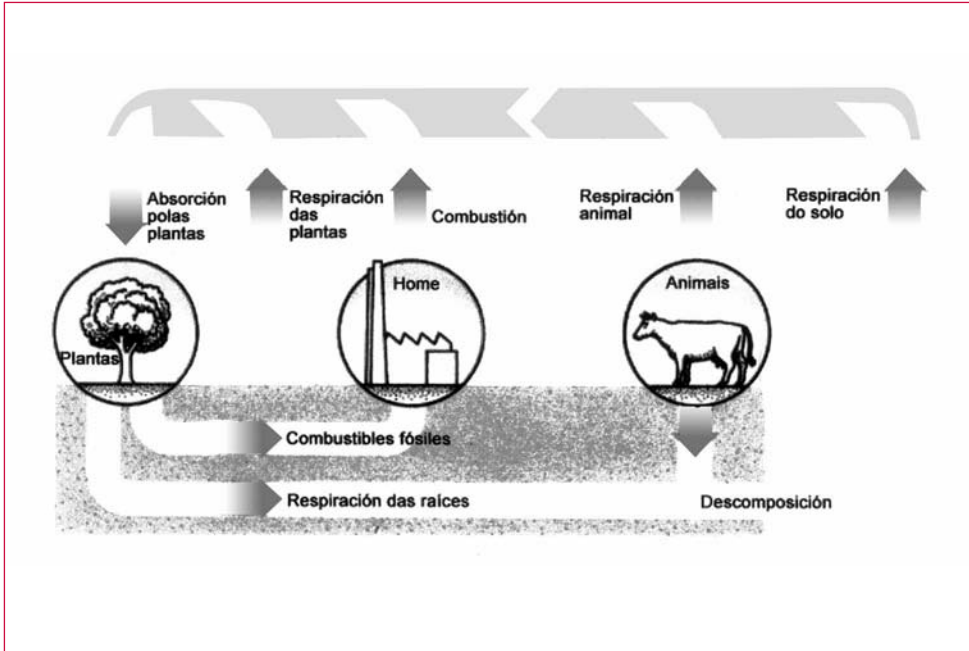
## 2.D. O CICLO DO CARBONO, NITRÓXENO, FÓSFORO E OUTROS ELEMENTOS

Admítese que se alterou o ciclo do carbono porque, entre outras razóns, consumimos moita enerxía derivada de combustibles fósiles e, máis preocupante se cadra, reducimos a masa arbórea que emprega o CO<sub>2</sub> como materia prima para producir materia vexetal máis reducida. Dise que aumentamos perigosamente a concentración de gases inductores do efecto de invernadoiro —particularmente CO<sub>2</sub>— como consecuencia do uso masivo de combustibles fósiles (ó redor deste tema as preguntas acumúlanse pero pódense reducir a unha única: ¿como resolver o problema da enerxía da maneira máis eficaz?). Nun recente traballo do Grupo Internacional de Traballo no Programa Xeosfera-Biosfera (IGBP) publicado en *Science*, 2000, 290, 291, titulado "The global carbon cycle: a test of our knowledge of earth as a system", abórdase o tema desde diferentes

disciplinas con rigorosidade científica. A xuízo dos autores este estudio era absolutamente necesario neste momento dado que as tendencias de consumo de enerxía procedentes da queima de combustibles fósiles, as previsións de crecemento da poboación e a falta de acordo dos organismos de carácter mundial para o control do consumo de enerxía parecen conducir fatalmente a un incremento insostible da concentración de CO<sub>2</sub> atmosférico neste novo século. Ademais é absolutamente necesario coñecer as consecuencias de todo tipo —económicas, enerxéticas, tecnolóxicas...— que podería provocar a modificación do ciclo de carbono iniciado hai uns douscentos anos a consecuencia desta actividade humana desbocada. A clave de todo o estudio, obviamente, é comprender os mecanismos de absorción de CO<sub>2</sub> polo sistema terrestre, é dicir, comprender os mecanismos de reciclación do carbono. Os investigadores, no seu estudio, trataron de contestar a dúas preguntas: 1) ¿pódense distinguir entre perturbacións antropoxénicas e naturais no clima e ciclos bioxeoquímicos? e 2) ¿Cal é a sensibilidade do clima da Terra ós cambios na concentración de CO<sub>2</sub> atmosférico?

Os autores sinalan dúas conclusións transcendentales desta amplísima análise que abarca tamén os ciclos do nitróxeno, fósforo, etc.:

1) Os procesos naturais de absorción de CO<sub>2</sub> (polos océanos, polos sistemas ecolóxicos terrestres e tamén



O dióxido de carbono está equilibrado cando o están os procesos naturais que o producen. Tomado de Ralph Hardy *et al.*, *El libro del clima*, Madrid, Hermann Blume, 1983.

atmosféricos) están actuando para reducir a velocidade do incremento da concentración do  $\text{CO}_2$  xerado actualmente. Pero o máis importante é que non dispoñemos doutras armas “milagrosas” para actuar sobre as previsións de crecemento —enormes— de  $\text{CO}_2$  para o próximo século.

2) O estado de coñecemento actual é insuficiente para describir, de forma precisa, as consecuencias da situación vixente, e futura, do ciclo do carbono e, por conseguinte, necesitanse outros estudos máis concretos para resolver as dúbidas.

## 2.E. A QUÍMICA

Moverse desde os macrosistemas —o universal ou global— ós microsistemas —o particular— significa desprazarse desde a virtualidade da política ata a realidade da química. Quizais a Química Orgánica, por ser a química do carbono, teña unha especial responsabilidade na axeitada formulación e resolución dos problemas locais. Sendo, como son, químico orgánico, propoño algunhas actuacións.

Aínda que, *a priori*, puidese parecer banal, creo que un primeiro

argumento —provocador— que a química debe ter presente é a revisión do actual concepto, un tanto “quimiocéntrico”, creo eu, do rendemento dunha reacción ou proceso químico. O concepto básico non serve na actualidade porque induce a erro: o de crer que unha reacción ou proceso químico é tanto mellor canto maior é o rendemento químico (eq) e/ou rendemento estereoquímico (ee) que produce, sen ter en conta os subproductos que se xeran e a súa reciclabilidade ou impacto ambiental por acumulación. Por esa razón creo que hai que redefinir ese termo. Propoño que falemos (e tomemos decisións) en termos globais, que definamos da eficacia global o rendemento global (rdtog) dunha reacción química ou proceso químico. Poderíase expresar a través dunha ecuación (rdtog= eq x em, ou ben rdtog= ee x em) que toma en consideración non só a eficacia química (eq) e a eficacia estereoquímica (ee) senón tamén a eficacia do medio ou reciclabilidade (em).

$$\text{rdtog}=\text{eq} \times \text{em}$$

ou ben

$$\text{rdtog}=\text{ee} \times \text{em}$$

onde o novo termo: eficacia do medio, ou reciclabilidade, se definiría como o inverso do impacto ambiental por acumulación; termo, pola súa parte, directamente relacionado coa toxicidade.

$$\text{em}=1/\text{imp. amb. acum.}$$

Aderezado cun pouco de dramatismo, o argumento central é o seguinte: creo firmemente que a química seguirá sendo unha das áreas da ciencia con mellores perspectivas de futuro aínda que cun pero: se, e soamente se, incorporamos este último argumento —reciclabilidade e impacto ambiental por acumulación— na nosa análise do rendemento dunha reacción ou proceso químico, atendendo así ás demandas sociais sobre a calidade medioambiental.

Acudamos a exemplos significativos que nos permiten apreciar o argumento. Se examinamos o que coñecemos sobre a catálise enantioselectiva, atopámonos con que os mellores exemplos están, sen dúbida, na natureza. Esta usa, para a síntese enantioselectiva de moléculas orgánicas complexas (por exemplo, as moléculas orgánicas constituíntes dos organismos vivos) catalizadores multifuncionais (os encimas). Ademais, opera en medios acuosos e os subproductos das reaccións químicas, por ser solubles na auga, dilúense con facilidade, co que se consegue unha altísima eficacia ambiental (em) ó ter un impacto por acumulación —ou unha toxicidade— moi pequeno.

Estes sistemas catalíticos naturais son, pois, insuperables. Nos últimos anos non foi infrecuente atopar autores algo fachendosos que afirmaban que dispuñan dun sistema catalítico superior a un sistema natural. Sen dúbida é unha visión incompleta ou

parcial, soamente válida se se ten en conta o rendemento químico —ou estereotipado— pero certamente incorrecta cando se analiza o tema globalmente, cando se avalía o termo em. En efecto, desde o despegue da catálise enantioselectiva hai vinte ou trinta anos, o químico orgánico deseñou, fabricou e utilizou catalizadores monofuncionais —xeralmente ácidos de Lewis quirais— para sínteses enantioselectivas. En moitos casos os resultados son excelentes se só temos presente o seu eq ou ee (algúns, incluso, superan en eq e ee ós naturais). Sen embargo, esta aparente perfección convértese en inutilidade ( $rdtog=0$ ) unha vez que consideramos a súa em, xa que esta é cero ou próxima a cero. Así, a pesar da súa excelencia, a empresa química non os emprega. O motivo deste desinterese por unha serie de catalizadores metálicos aparentemente excelentes é moi claro: moitos dos deseñados ata o presente adoitan ter un impacto ambiental por acumulación (toxicidade) alto xa que normalmente usan metais (xa sexan metais p, d ou f) e, por conseguinte, teñen uns valores de eficacia ambiental em próxima a 0 (é dicir, se os empregase unha industria acumularíanse e crearían un conflito do medio considerable).

Hai uns anos B. M. Trost, adiantándose a toda a comunidade química, propuxo a necesidade de que a química fose “átomo económica”. Aínda máis recentemente, K. B. Sharpless (Angew. Chem, Int. Ed. Engl. 2001, 40,

2004) dedícase a promover a, así chamada, “click chemistry”, unha clase de química de altísimo  $rdtog$  posto que non xera subproductos. Por conseguinte, ó meu ver, parece que chegou a hora de que a investigación comece a tomar conciencia e acción decidida para este futuro que se achega: dispoñer de procesos químicos extremadamente eficientes (con altísimo  $rdtog$ ).

No título do seu traballo orixinal Trost propón, xa, unha solución ó seu problema: é preciso facer catálise homoxénea (catálise en disolución). Sen embargo, non abonda con empregar catalizadores en cantidades substequiométricas, cómpre restrinxir o uso de disolventes e de reactivos. En canto a disolventes, a natureza, como xa se dixo, utiliza catalizadores solubles en medios acuosos, polo que non se acumulan senón que se dilúen facilmente, obviamente porque vivimos nun mundo de auga que facilita esa dilución. Non hai que esquecer que, á fin e ó cabo, o problema do impacto ambiental por acumulación ou toxicidade non é máis ca un problema de dilución (lembramos: non hai produtos tóxicos, soamente hai concentracións tóxicas deses produtos). Engádaselle a esta característica a biodegradabilidade dos catalizadores naturais e temos unha fácil reciclabilidade da materia. Resulta, pois, evidente por qué a natureza emprega auga como disolvente das reaccións químicas que promove: os subproductos que se xeran son solubles en auga, polo

que se diluirán moi facilmente (e, polo tanto, rebaixarase a toxicidade). Debemos recordar que a principal tarefa do fígado é a de hidroxilar para, desta forma, aumentar a solubilidade na auga dos subproductos do noso metabolismo. Por todo isto, creo firmemente que haberá que investigar e, eventualmente, realizar unha nova química en auga ou medios acuosos.

Tamén se han de restrinxir os reactivos que usamos para a consecución dun determinado proceso ou transformación química. Fronte á natureza, que parece tratar de evitar o uso de ácidos de Lewis para activar centros electrófilos, nós, os químicos, botamos man deles con excesiva frecuencia. O mesmo cabe dicir dos oxidantes utilizados pola natureza e os usados polo home. Noutras palabras, a natureza parece preocuparse dos procesos de reciclación da materia, evitando así a acumulación, mentres a civilización humana, a través da química, a penas tivo en conta nos seus plans e deseños os procesos de reciclación da materia. A consecuencia é que temos agora zonas contaminadas, é dicir, zonas onde unha serie de produtos químicos se acumulan porque a súa velocidade de reciclación é moi lenta comparada coa dos subproductos químicos producidos pola natureza.

A frase “a natureza parece preocuparse...”, mencionada anteriormente, parece excesiva. Vexamos os feitos: na natureza é moito máis frecuente o uso de centros ácidos e básicos de

Brönsted (H+) ca de centros ácidos de Lewis (ións metálicos). Gústame pensar que, evolutivamente, é máis avanzado o uso de centros de Brönsted. Certamente sería interesante comprobalo. En calquera caso, está claro que a natureza é moito máis coidadosa ca nós no uso de metais como ácidos de Lewis. En contraste coa química, a natureza non emprega calquera metal como ácido de Lewis: só emprega metais como Zn, Mg, etc. que teñen un impacto ambiental por acumulación baixo. A este respecto, creo que é lícito especular coa idea de que a vida na Terra, tal como a coñecemos hoxe, apareceu só cando a eficacia do medio (em) dos seus procesos químicos comezou a aumentar (o seu impacto ambiental comezou a diminuír), quizais cando a evolución facilitou a aparición de procesos químicos catalizados por encima multifuncionais, con centros ácidos de Brönsted e operativos en medios acuosos (lembramos que se asume que a vida no planeta Terra apareceu hai uns tres mil millóns de anos, posiblemente na auga, e que o universo que coñecemos ten unha existencia duns catorce mil millóns de anos). Durante ese período de tempo a evolución parece que dotou os sistemas naturais de catalizadores multifuncionais operativos na auga, mentres que a maior parte dos procesos químicos utilizados polo home na actualidade implican catalizadores ou activadores monofuncionais baseados en ácidos de Lewis.

Como conclusión citarei os, segundo a miña opinión, máis importantes obxectivos que a química debe alcanzar no máis inmediato futuro:

1. É preciso deseñar catalizadores de fácil reciclabilidade para todo tipo de conversión química.

2. Cómpre conseguir catalizadores que operen na auga e, polo tanto, con  $em >> 0$ .

3. Hai que desenvolver catalizadores bifuncionais e polifuncionais

que, analogamente ós sistemas encimáticos, permitan activar os compoñentes (nucleófilo e electrófilo) dunha reacción química polar, por intermediación de centros ácidos e básicos de Brönsted, ou de Lewis cun impacto ambiental por acumulación baixo.

Máis abreviadamente e para todos os públicos: temos que axudar a reciclar o binomio materia/enerxía. Está nas mans dos nosos gobernantes, pero tamén nas nosas.



José María SAA, "¿Que facemos coa Química? A perspectiva dun químico", *Revista Galega do Ensino*, núm. 38, febreiro, 2003, pp. 47-71.

*Resumo:* Todas as interconversións, naturais ou artificiais, de materia e enerxía producen refugallos. Os químicos, como enxeñeiros moleculares que son, deben manexar o binomio materia/enerxía cada vez con máis frecuencia. Por iso, a reciclaxe natural de materia/enerxía reséntese e aparecen á nosa vista os conflitos derivados dese uso masivo e frecuente de materia/enerxía. O home constituíuse así nunha nova forza da Natureza. Na era do Antropoceno (P. Crutzen) os químicos deben facilitar a reciclabilidade de materia/enerxía facendo "economía de átomos" (B. M. Trost) e operando na auga.

*Palabras chave:* Química. Medio. Materia. Enerxía. Antropoceno. Reciclabilidade.

*Resumen:* Todas las interconversiones, naturales o artificiales, de materia y energía producen desechos. Los químicos, como ingenieros moleculares que son, deben manejar el binomio materia/energía cada vez con mayor frecuencia. Por ello, el reciclaje natural de materia/energía se resiente y aparecen a nuestra vista los conflictos derivados de ese uso masivo y frecuente de materia/energía. El hombre se ha constituido así en una nueva fuerza de la naturaleza. En la era del Antropoceno (P. Crutzen) los químicos han de facilitar la reciclabilidad de materia/energía haciendo "economía de átomos" (B. M. Trost) y operando en agua.

*Palabras clave:* Química. Medioambiente. Materia. Energía. Antropoceno. Reciclabilidad.



*Summary:* All the natural or artificial interconversions of matter and energy produce waste. Chemists, being molecular engineers, must use the binomial matter/energy more often. That is the reason why the natural recycling of matter/energy has been affected and the conflicts derived from that extensive and frequent use of matter/energy have been made evident. In that way man has become a new force of nature. In the area of Antropoceno (P. Crutzen) chemists should facilitate the matter/energy recyclability by making an “economy of atoms” (B. M. Trost) and by operating in water.

*Key-words:* Chemistry. Environment. Matter. Energy. Antropoceno. Recyclability.

—Data de recepción da versión definitiva deste artigo: 18-05-2002.

