



CEU

*Universidad
San Pablo*

Facultad de Farmacia

Química Verde para un mundo sostenible

Javier Pérez Castells
Doctor en Química
Universidad CEU San Pablo

Festividad de la Inmaculada Concepción
Diciembre de 2008

CEU Ediciones

Química Verde para un mundo sostenible

Javier Pérez Castells

Doctor en Química

Universidad CEU San Pablo

Festividad de la Inmaculada Concepción

Diciembre de 2008

**Facultad de Farmacia
Universidad CEU San Pablo**

Química Verde para un mundo sostenible

No está permitida la reproducción total o parcial de este trabajo, ni su tratamiento informático, ni la transmisión de ninguna forma o por cualquier medio, ya sea electrónico, mecánico, por fotocopia, por registro u otros métodos, sin el permiso previo y por escrito de los titulares del copyright.

Derechos reservados © 2008, por Javier Pérez Castells

Derechos reservados © 2008, por Fundación Universitaria San Pablo-CEU

CEU Ediciones

Julián Romea, 18 - 28003 Madrid

<http://www.ceu.es>

Depósito legal: M-xxxx-2008

Compuesto e impreso en el Servicio de Publicaciones de la Fundación Universitaria San Pablo-CEU

Excmo. y Magnífico Señor Rector

Ilustrísimo Señor Vicerrector

Ilustrísimos Señora Decana y Director de la Escuela Politécnica Superior

Ilustrísimos Vicedecanos y Secretarios Académicos

Queridos compañeros, alumnos, padres, familiares y amigos

“La conservación del medio ambiente, la promoción del desarrollo sostenible y la atención particular al cambio climático son cuestiones que preocupan mucho a toda la familia humana. Ninguna nación o sector comercial puede ignorar las implicaciones éticas presentes en todo desarrollo económico y social. La investigación científica demuestra cada vez con más claridad que el impacto de la actividad humana en cualquier lugar o región puede tener efectos sobre todo el mundo. Las consecuencias del descuido del medio ambiente no se limitan a la región inmediata o a un pueblo, porque dañan siempre la convivencia humana, y así traicionan la dignidad humana y violan los derechos de los ciudadanos, que desean vivir en un ambiente seguro”.^[1]

Son palabras de Su Santidad el Papa Benedicto XVI al último “Simposio Sobre Religión, Ciencia y Medio Ambiente”.

Inicio mi charla de hoy con esta referencia porque les voy a hablar de la contribución que la Química esta haciendo a este esfuerzo colectivo para la conservación del medio ambiente y el desarrollo sostenible. Dicho esfuerzo se ha plasmado en una serie de paradigmas aplicables tanto a la industria química

como a la llamada Química fina o a pequeña escala, y recibe en conjunto el nombre de Química Verde o Química Sostenible.

Tengo que agradecer profundamente al equipo de gobierno de mi Facultad de Farmacia y en especial a su decana, esta oportunidad de hablar de un tema apasionante para mí, quizás menos para la mayoría de ustedes, pero que, créanme, nos interesa a todos. Intentaré transmitirles al menos algo de nervio y de curiosidad, y no voy a dejar de hacer de esta charla un gran ejercicio de publicidad y reivindicación de la ciencia a la que he dedicado mi vida profesional y a la que me hace feliz servir modestamente, que es la Química.

La percepción sobre la Química adquiere en la actualidad básicamente dos formas: para la gente relacionada con la ciencia y la industria es vista como la solución a los problemas, el medio para llegar al desarrollo y el origen de los bienes de uso diario; y para el ciudadano común, resulta algo peligroso y que debe ser evitado a toda costa. No siempre hubo esta disparidad de sentimientos entre el mundo científico y el resto de la sociedad. Tan solo hace unas décadas el ciudadano normal comprendía muy bien que la rápida mejora en su calidad de vida y el acceso de amplias capas de la sociedad a bienes otrora reservados para los más pudientes, era consecuencia directa del desarrollo científico y tecnológico, con una participación casi siempre destacada de la Química, en particular la Química Orgánica (Figura 1).

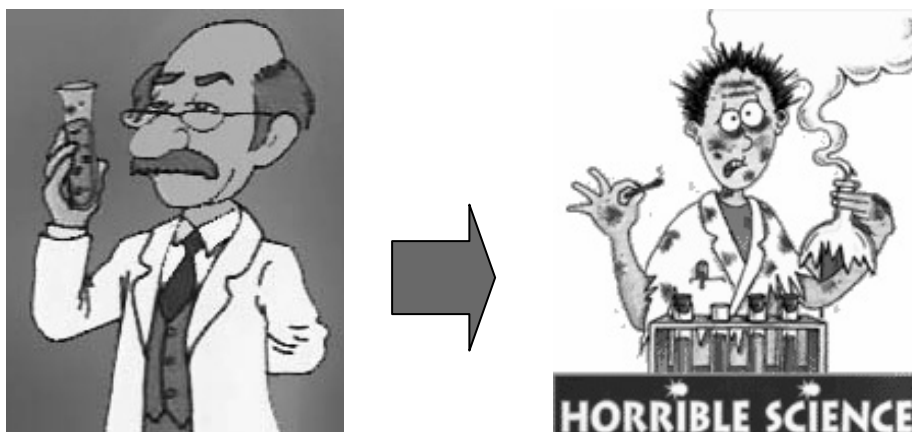


Figura 1. Del científico respetable a la ciencia horrible.

Así, por poner tan sólo unos ejemplos no exhaustivos, en los años posteriores a la segunda guerra mundial, la población del primer mundo observaba cómo se curaban las infecciones bacterianas que antes de dicha guerra eran en muchos casos mortales, que la calidad y el precio de los tejidos permitía a muchas más personas disponer de un mejor y más variado vestuario, o que se extendía el uso de pequeños y grandes electrodomésticos, fabricados con polímeros orgánicos, mejorando la calidad de vida, en especial de las mujeres. ¡Cuántos efectos sociopolíticos tuvieron estos avances! y además ¡cómo contribuyeron al desarrollo de un mundo más igualitario, más justo y más feliz! Sin embargo, todos los que estamos en esta sala sabemos que las cosas han cambiado mucho. Es casi una constante escuchar ataques desde distintos sectores de la sociedad hacia la ciencia en general pero muy especialmente hacia la Química, como origen de problemas de salud pública, medioambientales, etc. Este ambiente se propaga al mundo de la publicidad, que identifica lo químico como negativo, contrario a la naturaleza, perjudicial para la salud, contaminante, de baja calidad etc. Anuncios que nos presentan vino sin química, yogures sin química y hasta desodorantes o detergentes sin productos químicos, son el reflejo de una sociedad que se ha hecho muy consciente del costo ambiental que el desarrollo tecnológico ha tenido y culpa, injustamente, a aquellos que lo lograron, como si el mundo científico les hubiera ocultado los peajes a pagar por su desarrollo.

Es indudable que cualquier avance científico produce beneficios pero también consecuencias negativas, incluyendo nuevos perjuicios éticos que deben ser cuidadosamente estudiados. Sin embargo, en lo referente al papel que la Química ha tenido, lo primero que debe recordarse es que el plato de la balanza que presenta los beneficios es mucho más pesado que el de los inconvenientes.

Baste recordar un dato: la población de la tierra se mantuvo estable desde tiempo del imperio romano hasta finales del siglo XVII en unos 600 millones de habitantes. Que en la actualidad este planeta sea capaz de alimentar, vestir y dar energía a unos siete mil millones de personas, si bien de forma dramáticamente desigual, se explica en buena parte por el incremento de la productividad agrícola, gracias a los abonos, pesticidas, plaguicidas etc. El suelo produce hoy día hasta setenta veces lo que producía en la época medieval. También se debe esto a la aparición de los tejidos sintéticos y a la producción masiva de energía utilizando un variado abanico de fuentes, incluida la nuclear (Figura 2).

El movimiento ecologista plantea a veces la necesidad de retornar a cultivos no coadyuvados por productos químicos, a ropajes confeccionados con tejidos de procedencia vegetal o animal, o al consumo de carnes y pescados criados con procedimientos denominados naturales. No debemos perder de vista el hecho de que quienes tienen la fortuna de poder consumir este tipo de productos son minorías acomodadas de los países del primer mundo. Su extensión a toda la población, es sencillamente imposible. No es por tanto este esquema de consumo una forma de vida más respetuosa con el medio ambiente, es sencillamente un privilegio de ricos.



Figura 2. Química en la vida cotidiana.

Pero indagemos algo más acerca del brusco cambio en la percepción que la sociedad tiene sobre la ciencia. En el siglo XIX ya se planteó la diatriba referente a dos actitudes extremas ante la ciencia: Por un lado, la visión baconiana asume que el progreso de la humanidad sólo es posible explotando los recursos naturales a partir del desarrollo científico y tecnológico (el conocimiento es poder). El desarrollo llevará a una mejora en la calidad de vida y finalmente a construir una sociedad más humana. Por otro lado, ya en el siglo XIX, se plantean los problemas de un desarrollo descontrolado de la ciencia con resultados desastrosos para la humanidad como las armas de destrucción masiva, el deterioro medioambiental y la creación de seres vivos en laboratorios (el hombre jugando a ser Dios). Es la visión frankensteiniana que

aparece en la novela de Mary Shelley y que suscriben muchos movimientos ecologistas.

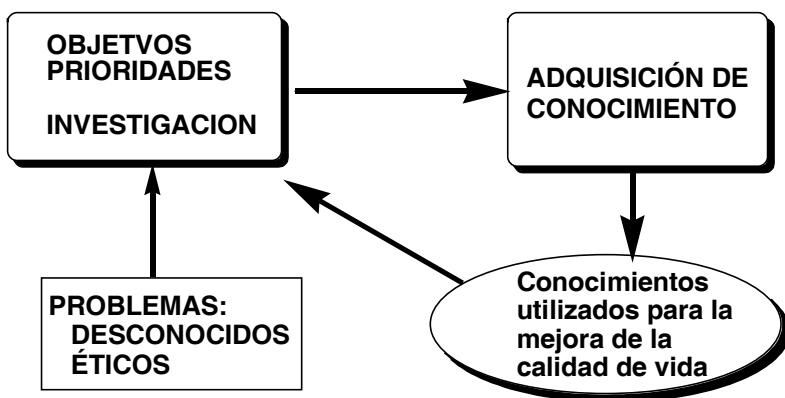
Como suele suceder una postura mesurada es la más conveniente. No es razonable decir que un científico se limita a buscar verdades, acumulando datos, para que sea la sociedad la que decida qué hacer con ellos, cuáles es conveniente utilizar, cuáles no interesan o cuáles no deben utilizarse por problemas éticos. No hay nadie mejor preparado que la propia comunidad científica para evaluar los problemas asociados al desarrollo y proponer soluciones. Pero es la hora de aunar esfuerzos (Figura 3). Los conservacionistas y los científicos deben dejar de mirarse con recelo y trabajar por un objetivo que es común. Los científicos no deben ser denostados como culpables pero sí deben asumir una especial responsabilidad en la solución y vigilancia de los problemas. En efecto, es la comunidad científica, la misma que creó el DDT, la que construyó la fábrica de Bophal, los productos que han ocasionado el agujero en la capa de ozono, y la denostada bolsa de plástico, la única que puede inventar nuevos productos y fábricas que desemboquen en estilos de vida sostenibles.[2]



Figura 3. Los caminos convergentes de la ciencia y el conservadurismo.

Estudiemos el problema de la contaminación ambiental debida al desarrollo industrial, específicamente del sector químico. Resulta ciertamente doloroso que la misma sociedad que demanda soluciones y mejoras para su vida sea después implacable a la hora de culpar al sector industrial de cualquier inconveniente asociado a dichas mejoras. Sobretudo si, con los conocimientos del momento o con la mentalidad de una época determinada, no existe capacidad de conocer los efectos negativos de un determinado descubrimiento, o bien se manifiestan demasiado tarde para ser evitados (Esquema 1).

Sirva un conocido ejemplo para ilustrar esto: Es fácil entender que la colonización española de América es muchas veces tratada injustamente al ser juzgado el comportamiento de unos hombres e instituciones del siglo XVI con planteamientos actuales. Igual de injusto es culpar de los problemas de destrucción medioambiental a la ciencia que los creó, cuando no podía saber el alcance del problema y partía de un axioma general para toda la humanidad: el de que la tierra tenía una capacidad ilimitada de recuperación y siempre sería un lugar habitable para el hombre.



Esquema 1

Pues bien, dice Whitesides, que la sociedad avanza cuando se descarta una asunción. Asumimos cuestiones como que somos mortales, que sólo los seres vivos piensan, que la vida tiene un valor ilimitado, que la privacidad es importante, o que las naciones son las más poderosas de entre las organizaciones humanas. Para todos estos ejemplos, hay al menos algunas personas que se plantean su veracidad a largo plazo.[3]

Tan solo hace unos 30 años se empezó a plantear la cuestión de la capacidad de la humanidad de destruir totalmente el medio en el que vive. Fue a resultas de la guerra fría y dio paso al concepto de sostenibilidad. La humanidad se hizo esta pregunta, ¿Estamos excediendo la capacidad de la tierra de asumir todos nuestros desperdicios y trasformarlos de nuevo en recursos a mayor velocidad que los gastamos? Pregunta que ha tardado en contestarse 30 años. Se considera el año 2006 como el punto de inflexión en la percepción social de este fenómeno. Por

encima de politizaciones absurdas, casi nadie discute ya que la respuesta a esta pregunta es afirmativa. Al tratarse de un problema global, su solución es global, y con responsabilidad de todos los sectores. La comunidad química sabe que tiene un protagonismo indiscutible y desde hace años ha ido desarrollando nuevas formas de trabajar que se han plasmado en varios documentos importantes. Así, la sociedad química más importante del mundo, la ACS (American Chemical Society, sociedad americana pero a la que pertenecemos muchos químicos europeos) expresa en su código de conducta lo siguiente:

“Los químicos tienen como responsabilidad profesional servir al interés público, al bienestar y al avance del conocimiento científico, preocuparse de la salud y el bienestar de sus compañeros, consumidores y la comunidad, comprender y anticiparse a las consecuencias medioambientales de su trabajo, evitar la contaminación y de proteger el medioambiente”.^[4]

La preocupación por las cuestiones medioambientales ha hecho que en los últimos años surja todo un enfoque dentro de la Química, en general, y de la Química Orgánica, en particular que tiene por objetivo evitar o minimizar la contaminación desde su origen, tanto a escala industrial como en los laboratorios de investigación o de carácter docente. Es lo que se denomina Química Verde o Química Sostenible. Esto supone un paso que va mucho más allá de lo que sería el mero hecho de un correcto tratamiento de los residuos potencialmente contaminantes que puedan generarse. Consiste en evitar la formación de desechos contaminantes y propiciar la economía de tiempo y recursos, así como en diseñar productos con menor riesgo ambiental, es decir, que reduzcan o eliminen el uso y producción de sustancias peligrosas.

Desde su concepción y definitivo impulso, en torno a 1991, la Química Verde ha crecido a nivel internacional como un enfoque especial en la Química. Se han creado organismos, redes, instituciones, revistas y programas educativos relacionados con la Química Verde. Su principal ventaja, lo que la hace creíble, es que da lugar a procesos más seguros que los procesos convencionales, de menor coste, y por supuesto, compatibles con un desarrollo sostenible. Y es que, por muy buenas intenciones que se pongan, la única forma de convencer a la gran industria de las bondades de esta nueva filosofía es que rebaje los costes y, por tanto, tenga viabilidad económica.

Tras esta aproximación cualitativa al concepto, debemos intentar cuantificar los parámetros que pretendemos mejorar con la aplicación de los postulados de

esta nueva disciplina. Puesto que hemos hablado de disminuir el riesgo, una ecuación adecuada sería la que expresa el riesgo químico como función del peligro y de la exposición. Así, nuestro objetivo general sería disminuir este riesgo, logrando que decrezcan sus factores, el peligro y la exposición a material nocivo o peligroso.

$$R = f(P, Ex)$$

En cuanto al término peligro, el sector químico no ha sido, afortunadamente, pródigo en grandes catástrofes. Sin embargo podemos citar un par de ejemplos bien conocidos que deben mover a la reflexión. Así, la tragedia del Love Canal, cerca de las cataratas del Niágara en los Estados Unidos. Un canal artificial de agua sin terminar fue utilizado por una industria química en los años cuarenta para descargar sus residuos peligrosos (cerca de veintiuna mil toneladas). Cuando la ciudad empezó a crecer el canal se cubrió por encima y el comité escolar solicitó ese terreno para la construcción de un colegio. En 1977, los problemas de salud entre la población ya eran evidentes. Los niños del colegio presentaban problemas en la piel por el contacto con la tierra del patio, las familias que comían vegetales de sus propias huertas enfermaban, la tasa de abortos espontáneos aumentó, los defectos de nacimiento crecieron, etc. Finalmente fue necesario evacuar a la población y regenerar el suelo.

La peor tragedia jamás ocasionada por una industria química ocurrió en Bhopal, India, en 1984. Podríamos dedicar toda la charla a esta tragedia, pero sólo indicaremos que consistió en una fuga de cuarenta y dos toneladas de isocianato de metilo en una fábrica de pesticidas propiedad de la compañía estadounidense Union Carbide. El accidente se produjo al reducirse los controles de seguridad para intentar darle viabilidad económica a la fábrica, cuando ya se había decidido su cierre y la producción estaba detenida. El contacto del producto almacenado con agua procedente de la limpieza de los reactores, inició una reacción exotérmica que provocó el estallido de las válvulas de seguridad de los tanques y con ello la liberación a la atmósfera del gas.[5]

Al entrar en contacto con la atmósfera, el compuesto liberado comenzó a descomponerse en varios gases muy tóxicos (fosgeno, metilamina, y especialmente ácido cianhídrico) que formaron una nube letal, que recorrió a ras de suelo toda la ciudad (Figura 4). Entre seis y ocho mil personas murieron de forma casi inmediata asfixiadas por la nube tóxica. Al menos otras doce mil fallecieron

posteriormente como consecuencia directa de la catástrofe, que afectó a más de seiscientas mil personas, ciento cincuenta mil de las cuales sufrieron graves secuelas. Además, perecieron también miles de cabezas de ganado y animales domésticos, y todo el entorno del lugar del accidente quedó seriamente contaminado.

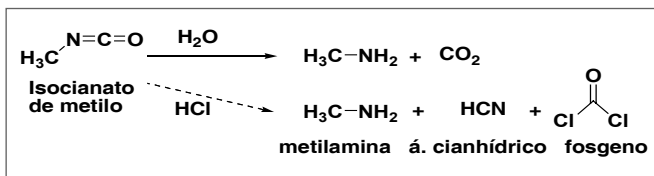
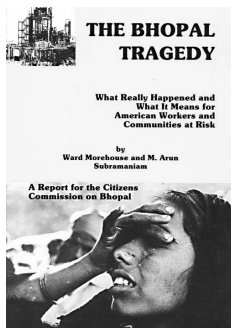


Figura 4. Reacciones del isocianato de metilo.

El primer objetivo es claro: por escasos que sean los grandes accidentes, no debemos permitir que sucedan de nuevo.

La disminución del segundo factor de la ecuación consiste en lograr que baje una cifra que habla por sí sola. En el año 2000, aproximadamente quince mil millones de kilogramos de sustancias peligrosas se emitieron al medio ambiente, lo que hace tres millones de kilogramos por día, dos toneladas por minuto.

Para lograr estos dos objetivos, se implementan una serie de prácticas que modifican los procesos sintéticos o cambian la naturaleza de los productos. Como puesta de largo de esta nueva manera de hacer las cosas Anastas y Werner, publicaron el primer manual sobre Química Verde en 1991 y resumieron las buenas prácticas en doce principios (Figura 5).[6] No los voy a leer pues algunos son, en cierta medida, redundantes, pero, en resumen, vienen a decir que deben diseñarse productos no tóxicos ni nocivos para el medioambiente, cuya síntesis sea segura, parta de materiales renovables, no utilice disolventes contaminantes, requiera poca energía, no forme subproductos inútiles, prefiriendo siempre los métodos catalíticos a los estequiométricos. En definitiva, sería como pedirle a un equipo de químicos que sintetice moléculas de estructura muy compleja, en un solo paso, con rendimiento cuantitativo, utilizando agua como disolvente,

a temperatura ambiente y desde productos de partida renovables, ¡como si los químicos pudieran superar a las mismísimas enzimas! Con un objetivo tan utópico, es evidente que hay mucho trabajo por hacer.

1. Es mejor evitar la formación de residuos que tener que tratarlos o limpiarlos cuando se han formado
2. Los métodos sintéticos deben diseñarse para maximizar la incorporación de todos los materiales en el producto final.
3. Los métodos sintéticos deben diseñarse para utilizar y generar sustancias que posean escasa o nula toxicidad para el hombre y el medio ambiente
4. El diseño de los productos químicos debe tener en cuenta la reducción de la toxicidad
5. Se debe evitar el uso de disolventes cuando sea posible
6. Los requerimientos energéticos deben ser minimizados en cuanto a su impacto medioambiental y económico
7. Los productos de partida deben ser renovables mejor que procedentes de fuentes no renovables
8. Se deben evitar las etapas innecesarias y los subproductos
9. Los métodos catalíticos son superiores a los estequiométricos
10. Las reacciones químicas deben diseñarse de forma que al finalizar su función sus productos no persistan en el medio ambiente
11. Analizar en tiempo real los procesos químicos para evitar la contaminación
12. Elegir los reactivos de manera que se minimicen los riesgos de accidentes químicos incluyendo escapes, explosiones e incendios

Figura 5. Los doce principios de la Química Verde.

Podemos presentar algunas estrategias desarrolladas hasta el momento y que se han plasmado en ejemplos ciertamente espectaculares. Casi todos estos casos han recibido el premio de la presidencia de los Estados Unidos a los retos de la Química Verde. Estos premios (*Presidential Green Chemistry Challenge Awards*) fueron creados en 1995 por la administración Clinton, y suponen un reconocimiento a los logros más relevantes conseguidos en la Tecnología/ Química Verde. Está previsto que la Comisión Europea ponga en marcha unos premios similares.[7]

Las acciones pueden clasificarse en tres grupos de estrategias (Figura 6):

1. Búsqueda de métodos de síntesis más verdes,
2. Condiciones de reacción más verdes y
3. Diseño integral de nuevos productos más verdes.

<ol style="list-style-type: none">1. Estrategias sintéticas más verdes Desde productos de partida renovables o asequibles Nuevos Reactivos catalíticos Economía atómica Síntesis convergentes2. Condiciones de reacción más verdes Reemplazar disolventes peligrosos por inocuos o realizar las reacciones sin disolvente Nuevos procesamientos Eliminar etapas de alto requerimiento energético3. Diseño de productos más verdes Productos menos tóxicos Más seguros Biodegradables tras su uso

Figura 6. Resumen de las estrategias verdes.

Así, en el capítulo dedicado a la búsqueda de estrategias sintéticas más verdes, se plantean varios objetivos, el primero de ellos, el uso de productos de partida renovables o asequibles. Por ejemplo, se ha descrito una nueva familia de polímeros termoplásticos basada en el ácido poliláctico procedente de las bayas de maíz. La nueva síntesis supone un ahorro de entre el veinte y el cincuenta por ciento del consumo de combustibles fósiles, y ya se producen ciento cuarenta mil toneladas por año. Son una alternativa a los plásticos tradicionales si bien sólo pueden competir en precio con ellos cuando el barril de petróleo supera los ochenta dólares. El uso de materias primas renovables corresponde a una actitud respetuosa por el medio ambiente y la naturaleza entera. Los recursos no renovables, definidos como aquellos cuyo ciclo de vida es muchas veces mayor que el de la vida humana, deben ser preservados para asegurar la calidad de vida de las generaciones futuras. El petróleo, por ejemplo, contiene sustancias muy difíciles y costosas de obtener por otros medios. Posiblemente los hombres del futuro considerarán que nosotros fuimos terriblemente irresponsables al consumir dicha riqueza química en obtener energía, simplemente, quemándola.

En segundo lugar es necesario mejorar los procesos catalíticos buscando una mayor selectividad y actividad que con los catalizadores tradicionales. Junto a los complejos metálicos disueltos, las nuevas formas de catálisis ocupan numerosas páginas de las revistas científicas más prestigiosas. Así, se han introducido los biocatalizadores (enzimas y células inmovilizadas que llevan a cabo reacciones químicas), los sólidos inorgánicos y la organocatálisis (pequeñas moléculas orgánicas capaces de catalizar reacciones). Los ejemplos son innumerables pero citemos el caso de la acrilamida, que se utiliza en la fabricación de papel, extracción de metales, industria textil, obtención de colorantes y en la síntesis de poliacrilamidas. Es el primer reactivo de la industria pesada obtenido por biocatálisis. La enzima activa es una nitrilo hidrolasa procedente de células de una bacteria, inmovilizadas en un gel de poliacrilamida. Deben buscarse, pues, catalizadores de alta eficiencia en conversión y selectividad, que operen en solventes inocuos, preferiblemente agua.

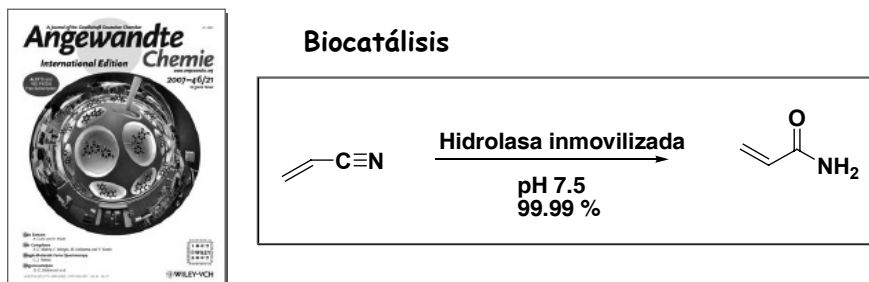


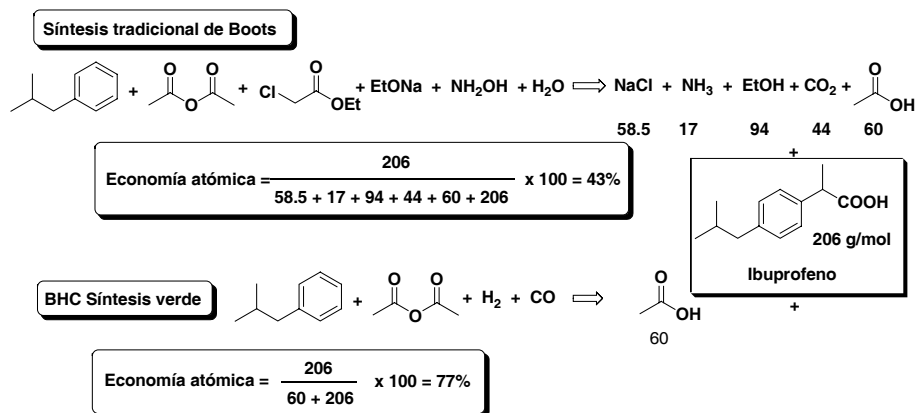
Figura 7. Síntesis de acrilamida utilizando biocatálisis.

Un concepto particularmente importante es el de la economía atómica. Cada síntesis química debe ser diseñada para maximizar la incorporación de los átomos usados en el producto final. Se deberán minimizar pues las etapas de protección o activación de grupos funcionales que implican reactivos adicionales y generación de residuos. Barry Trost, químico orgánico sintético de la Universidad de Stanford, ideó este concepto. Un ejemplo de este principio es el proceso, diseñado en 1991, para producir el analgésico ibuprofeno (Figura 8).



Figura 8. Ibuprofeno en distintas presentaciones.

En el proceso original, que constaba de seis pasos y que fue concebido en la década de los sesenta, sólo el cuarenta por ciento de la masa atómica de los reactivos permanecía en el producto (ibuprofeno) y el sesenta por ciento terminaban en productos secundarios no deseados o de desecho. El nuevo proceso de Trost consta de tres pasos y el setenta y siete por ciento de la masa atómica permanece en el ibuprofeno (Esquema 2). Este proceso verde elimina cientos de miles de kilogramos de productos químicos secundarios al año y reduce en cientos de miles la cantidad de kilogramos de reactivos que se necesitan para producir ibuprofeno. El proceso fue adoptado por la industria con entusiasmo porque suponía un importante ahorro y Trost recibió el premio presidencial.[8]



Esquema 2. Síntesis tradicional y síntesis verde del ibuprofeno con el cálculo de la economía atómica.

Un segundo conjunto de estrategias consiste en desarrollar condiciones de reacción más verdes. Los aspectos fundamentales a los que se refieren estas estrategias comienzan con la sustitución de disolventes peligrosos por los que no tienen efecto en la salud humana ni en el medioambiente. Los disolventes orgánicos volátiles son los habituales para las síntesis orgánicas y extracciones. Su uso es de dos mil millones de kilogramos por año. Entre ellos comentaremos los casos del benceno y el de los disolventes clorocarbonados. El benceno es un disolvente excelente pero carcinogénico, tanto, que su límite legal en agua potable es de sólo cinco partes por billón (ppb). Quizá recuerden el caso de las aguas Perrier. En 1990 ésta compañía encontró cantidades de doce ppbs en algunas de sus botellas de agua (el humo de cigarrillo tiene dos mil veces más benceno que esto). Se retiraron ciento sesenta millones de botellas. Este disolvente, con el que no hace muchos años se lavaban las manos en los laboratorios de investigación, ha desaparecido casi completamente de todos sus usos, siendo manejado, cuando es indispensable, bajo estrictas medidas de seguridad.

Otro caso es el de los disolventes clorados. Por ejemplo el diclorometano (CH_2Cl_2) o el percloroetileno ($\text{CCl}_3\text{-CCl}_3$), también sospechosos de ser carcinogénicos, nocivos para la capa de ozono, y utilizados de forma generalizada en extracciones y en síntesis, como en la extracción de la cafeína del café para fabricar café descafeinado. Además se usan en pinturas, barnices, limpiadores y pegamentos y para la limpieza en seco de tejidos. Pues bien, estos disolventes están siendo sustituidos por dióxido de carbono supercrítico. En la actualidad el veinticinco por ciento del café se descafeína mediante ésta nueva técnica y algunas tintorerías han empezado a utilizarla para la limpieza en seco de la ropa. El dióxido de carbono supercrítico es un excelente disolvente que no deja residuo alguno. Un fluido supercrítico es una sustancia que se encuentra en condiciones de presión y temperatura superiores a su punto crítico. El punto crítico representa la temperatura y la presión más elevadas a las que una sustancia puede existir como gas y como líquido en equilibrio. Un fluido supercrítico tiene la habilidad de actuar como un gas (difundiéndose a través de sólidos) y como un líquido (disolviendo materiales). Además, puede fácilmente variar de densidad debido a cambios menores en la temperatura o presión. Estas propiedades lo sitúan como un sustituto idóneo para los disolventes orgánicos. El dióxido de carbono, que pasa de sólido (hielo seco) directamente a gas a presión atmosférica, se comporta como un fluido supercrítico a altas presiones, y puede adoptar propiedades a medio camino entre un gas y un líquido (Figura 9).

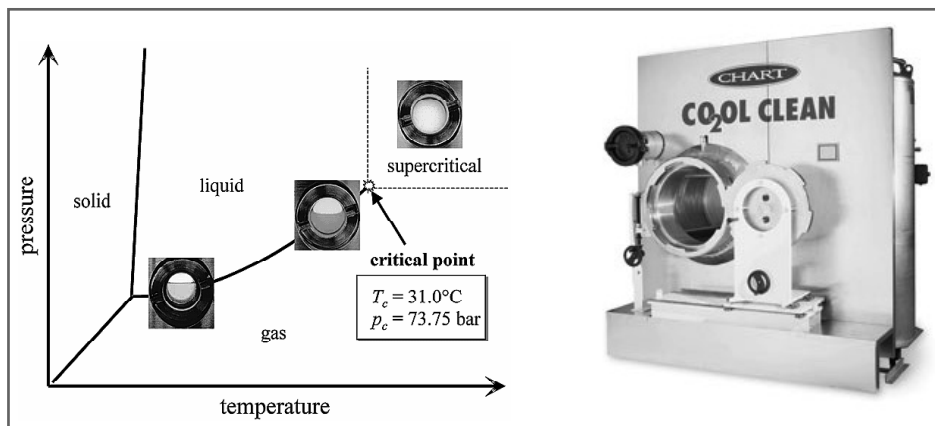


Figura 9. Diagrama de presión y temperatura para el CO₂.

Dentro de estas estrategias encaminadas a la búsqueda de condiciones de reacción más verdes, se encuentran también los nuevos procesamientos, por ejemplo en el tratamiento de aguas, basados en membranas biológicas selectivas, y la eliminación de etapas sintéticas de alto requerimiento energético, favoreciendo las reacciones en condiciones ambiente.

Finalmente, quizá el capítulo más interesante sea el del diseño de productos nuevos, menos tóxicos, más seguros y biodegradables tras su uso. Los productos químicos deben ser diseñados o rediseñados para que realicen su función con mínima toxicidad para la salud humana y para el ambiente, asegurando además que las sustancias utilizadas en los procesos se elijan para minimizar el riesgo de accidentes, incluyendo fugas, explosiones, incendios etc. Será necesario prever todo el ciclo de vida de las moléculas implicadas en cada proceso y asegurar que al final de su función los productos sean degradados hasta sustancias inocuas y/ o que no persistan en el ambiente. Dicho análisis del ciclo de vida incluye cinco etapas: premanufactura, manufactura, transporte, uso y fin de la vida útil.

Cada una de esas etapas es caracterizada por los recursos que utiliza: energía, productos químicos, auxiliares, disolventes, agua etc. Y cada una de ellas puede generar residuos. Los componentes mismos de la naturaleza: agua, oxígeno, sílice etc., serán los únicos desechos aceptables para la Química Verde. El análisis busca reconocer el impacto ambiental y los riesgos para la salud humana en cada etapa y en el ciclo completo.

Un primer ejemplo de esta estrategia integradora es el desarrollo de nuevos antiincrustantes para pinturas utilizadas en los cascos de los buques. Se trata de aditivos que evitan que se incrusten organismos marinos en los cascos evitando tener que sacarlos a dique seco periódicamente. Los tradicionales son sales de estaño y se liberan parcialmente en las aguas, persistiendo en los fondos marinos por tiempo casi ilimitado. Los organismos marinos se contaminan con estas sales haciendo que la pesca en determinadas zonas de tráfico intenso de barcos, no sea apta para el consumo. Recientemente se desarrolló un compuesto orgánico, el DCOI (4,5-dicloro-2-octil-4-isotiazolin-3-ona), que cumple su papel antiincrustante a la perfección al ser muy tóxico para muchos organismos marinos, pero que, una vez liberado en el agua de mar, se degrada rápidamente a productos inocuos (tiempo de vida media inferior a una hora). Es por tanto un producto idóneo, bajo los principios de la Química Verde, que está sustituyendo al estaño en la formulación de las pinturas.[9]

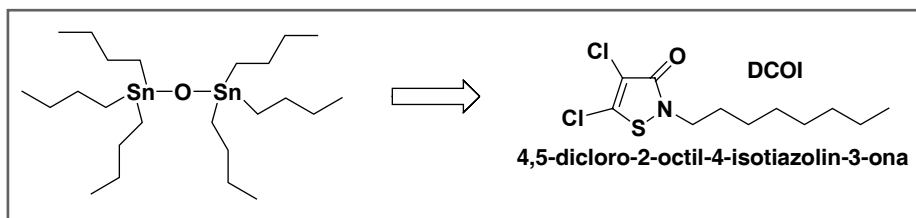


Figura 10. Estructura de los antiincrustantes basados en estaño y el nuevo antiincrustante verde.

Otro ejemplo que ilustra cómo ha evolucionado el pensamiento en el diseño de productos, es el caso de los insecticidas (Figura 11). Los insecticidas de síntesis aparecen en los años cuarenta, siendo el más conocido el DDT, o 1,1,1-tricloro-2,2-bis(4-clorofenil)-etano, un insecticida que pertenece a la familia de los clorados, descubierto por Müller. También el aldrin y dieldrín pertenecen a este grupo.

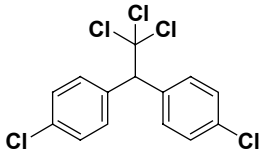
El uso del DDT trajo aparejado una serie de inconvenientes, ya que no presenta selectividad, se acumula en tejidos grasos del hombre y animales y persiste en el medio ambiente durante décadas. Se dijo que era carcinogénico que produciría esterilidad y que acabaría con todos los pájaros del mundo. Típica argumentación exagerada e infundada científicamente para lograr un impacto social y lograr su prohibición. En efecto, en los años 70 este compuesto fue prohibido en la

mayoría de los países. La polémica que rodea al DDT es un ejemplo perfecto del pulso que el conservacionismo, la ciencia, la ética y la política mantienen en este campo, y sobre el que volveremos más tarde.

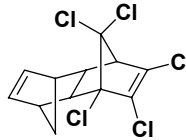
El siguiente grupo de insecticidas fue descubierto por Schrader y está formado por compuestos órgano fosforados, que por su poder insecticida, su metabolismo en animales y su comportamiento bioquímico reemplazaron rápidamente a los clorados. Los primeros insecticidas órgano fosforados fueron muy tóxicos, tal es el caso del Parathion. En la actualidad los últimos insecticidas fosforados tienen una toxicidad más moderada, siendo ejemplos de ello el diazinon y el clorpirifos. Si bien no presentan los mismos problemas de persistencia, ni de acumulación en tejidos grasos que tienen los clorados, los insecticidas fosforados son igualmente indiscriminados. Su mecanismo de acción es la inhibición de la acetilcolinesterasa que provoca la parálisis del músculo liso, y asfixia. Un mecanismo idéntico, y con compuestos de estructura parecida es el que siguen los gases nerviosos de uso militar. Un paso más se logró con los insecticidas carbámicos. Los carbamatos, por su carácter selectivo, que se logra mediante modificaciones en la estructura del ácido carbámico, pueden ser activos contra algunos insectos e inactivos contra otros. Algunos ejemplos de este tipo de compuestos son el propoxur y el bendiocarb.

El camino hacia la especificidad (todavía relativa) y la seguridad toxicológica comienza con el uso de los piretroides. Partiendo de un extracto vegetal, el piretro, utilizado como insecticida popular desde el siglo XIX, a partir de la década del 70 se sintetizaron diversos piretroides. Estos insecticidas de tercera generación, se pueden clasificar en dos grandes categorías: por un lado, los piretroides fotolábiles que se descomponen por acción de la luz y la temperatura muy rápidamente. Su uso está restringido a aplicaciones domésticas (aerosoles, etc). Son ejemplos de este grupo la alletrina y la resmetrina. Por otro lado, los piretroides fotoestables que son utilizados en aplicaciones de saneamiento ambiental (ej. deltametrina, ciflutrin, etc.). Los piretroides presentan una alta potencia insecticida (para algunas especies) junto como una gran seguridad toxicológica.

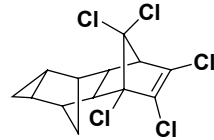
Insecticidas clorados



1,1,1-Tricloro-2,2-bis(4-clorofenil)-etano
DDT

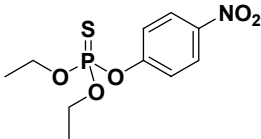


Aldrin

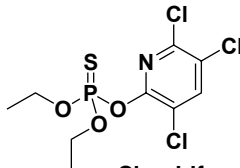


Dieldrin

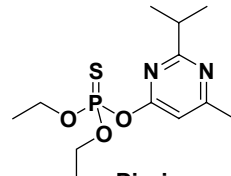
Insecticidas fosforados



Parathion

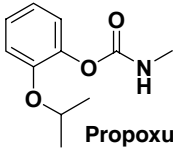


Clorpirifos

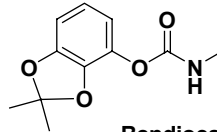


Diazinon

Insecticidas carbamatos

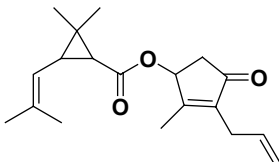


Propoxur

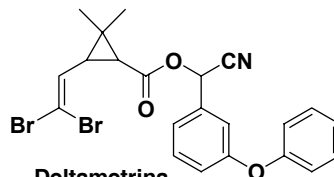


Bendiocarb

Piretroides



Alletrina



Deltametrina

Figura 11. Estructuras de las generaciones pre-verdes de los insecticidas.

La solución “verde” a los insecticidas es pues buscar la toxicidad selectiva hacia la especie nociva. Esto se ha logrado con nuevos compuestos diseñados a la manera de los fármacos y cuya diana es, por ejemplo, la fisiología del crecimiento del insecto. Así, el crecimiento de algunos insectos se acompaña de la muda periódica de la cutícula externa. La cutícula es un polímero de acetilglucosamina, llamado quitina, que no puede elongarse una vez biosintetizado. Cuando el insecto crece, debe sintetizar una nueva cutícula y deshacerse de la antigua. La

muda se inicia cuando se incrementan los niveles de la hormona esteroídica 20-hidroxiecdisona (20E). Si desciende el nivel de 20E se detiene la muda. El objetivo ha sido mimetizar a la 20E con una molécula que engañe al insecto haciendo que la muda no se detenga y el insecto no retorne a su estado normal. Deja pues de alimentarse y muere. Ejemplos de este tipo de compuestos son la tebufenozida que acaba con ciertas orugas, o la halofenozida que mata larvas de escarabajo. No hay daño para los insectos beneficiosos, la toxicidad para los organismos superiores es baja y las moléculas tienen un ciclo corto de vida (Figura 12). El problema es el inmenso gasto que supone su desarrollo y síntesis lo que las convierte en idóneas pero fuera del alcance de los países en vías de desarrollo.

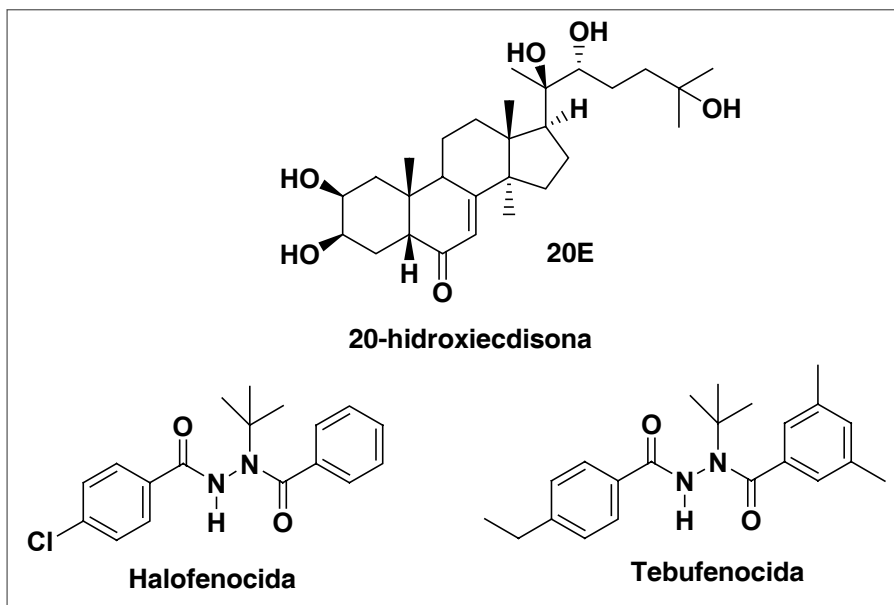


Figura 12. Estructura de la 20-hidroxiecdisona y de dos miméticos suyos con poder insecticida.

Respecto a esto, volvamos, para terminar, a la polémica sobre el DDT. Aunque es cierto que se acumula en la cadena trófica es muy dudoso su poder carcinogénico para los animales y el hombre. En los últimos años, tanto las organizaciones mundiales de vigilancia como el Convenio de Estocolmo sobre Contaminantes Orgánicos Persistentes y la comunidad científica en general, se encuentran divididos. Los defensores del uso del DDT, argumentan que este es un método eficaz contra

la malaria; afirman que gracias a ella la malaria desapareció de Europa, donde era endémica en Grecia o Italia. En Sri Lanka, los casos de malaria descendieron desde tres millones de casos en 1948 a veinte en 1963; en la India, de cien millones de casos en 1935, la cifra bajó a trescientos mil en 1969. Incluso circula la cifra que afirma que la prohibición del DDT ha causado cincuenta millones de muertes. Defienden su idoneidad basándose en la eficacia que le atribuyen, junto con el bajo coste de su aplicación y el hecho de que no tenga problemas de patentes. Precisamente algunos argumentan la prohibición fue orquestada por la propia industria, la cual, al acabar las patentes del DDT, impuso nuevos pesticidas con patente.

Sin embargo, la comunidad ecologista y parte de la comunidad científica duda de esta benignidad, atribuyendo potencial nocivo e incluso cancerígeno al DDT. En cualquier caso, el DDT se comenzó a abandonar una década antes de su prohibición por la aparición de nuevos insecticidas más efectivos y por la aparición de cepas resistentes de insectos. En la India, donde no ha sido prohibido en todos estos años, su uso ha disminuido notablemente.

Este debate ilustra bien el problema ético que hay detrás de este problema. Volvamos a las palabras de Su Santidad el Papa en el discurso con el que iniciaba esta charla:

“Aunque es verdad que los países en vías de industrialización no son moralmente libres de repetir los errores pasados de los demás, dañando temerariamente el ambiente, también es cierto que los países altamente industrializados deben compartir “tecnologías limpias” y garantizar que sus propios mercados no sostengan la demanda de bienes, cuya misma producción contribuye al aumento de la contaminación”.

Y no olvidemos que la ética no se sostiene tan sólo por la ética. Hacen falta convicciones y sentimientos más profundos para interiorizar la idea de preservar este mundo para las generaciones futuras. Porque supone sacrificios personales y toma de posturas públicas políticamente incorrectas y económicamente costosas.

Para los químicos, la Química Verde es un camino a seguir porque es científicamente consistente, económicamente eficiente, y colabora en la construcción de una civilización sostenible. Parafraseando un conocido, pero ya en desuso anuncio de cerveza, al hacer química, ¡piensa en verde!

Muchas gracias.

Bibliografía

- [1] Obtenido de la página web oficial del Vaticano:
http://www.vatican.va/holy_father/benedict_xvi.html
- [2] McCoy, M. “Converging pathways” *Chem. Eng. News.*, August 18, 2008, pp47.
- [3] G. M. Whitesides *Angew. Chem. Int. Ed.* 2004, 43, 3632–3641.
- [4] Véase la página web de la ACS:
<http://portal.acs.org/portal/acs/corg/content>
- [5] Mark D. Abkowitz, *Operational Risk Management: A Case Study Approach to Effective Planning and Response*, John Wiley & Sons, 2008.
- [6] P. T. Anastas, J. C. Warner, *Green Chemistry: Theory and Practice*, Oxford University Press, 2000 (última edición). Otros manuales: (a) A. S. Matlack, *Introduction to Green Chemistry*, Marcel Dekker, 2001. (b) M. Lancaster, *Green Chemistry: An Introductory Text*, University of York, RSC, 2002.
- [7] Página web de la EPA (Environmental Protection Agency) con enlaces sobre “Green Chemistry Presidential Awards”:
<http://www.epa.gov/gcc/pubs/pgcc/presgcc.html>
- [8] B. M. Trost, *Science*, 1991, 254, 1471.
- [9] R. A. Maureen; The Squeeze on Tributyltins. *Chem. Eng. News.* April 27, 1998, pp 41.

Javier Pérez Castells (Madrid 1967) es Catedrático de Química Orgánica y Farmacéutica en la Facultad de Farmacia de la Universidad CEU San Pablo.

Doctor en Química por la Universidad Complutense de Madrid, y Licenciado en Ciencias Empresariales por la UNED, obtuvo el premio extraordinario de doctorado por su tesis en el campo de los antibióticos beta-lactámicos.

Dirige el grupo de investigación en compuestos organometálicos desde el 2000 con el que desarrolla metodología sintética en reacciones mediadas por metales de transición así como sintetiza productos con potencial actividad biológica, habiendo sido responsable de varios contratos con la industria farmacéutica. También trabaja en estudios sobre la estructura tridimensional de biomoléculas en el marco de una colaboración con el CSIC resultad de una estancia sabática.

Ha publicado más de 50 trabajos en revistas internacionales, ha sido responsable de 4 proyectos de investigación financiados por instituciones públicas, ha dirigido 3 tesis doctorales , numerosos diplomas de estudios avanzados y ha recibido tres premios Angel Herrera a la investigación y la mejor labor docente.