

Enseñanza

ENSEÑANZA Y DIVULGACIÓN DE LAS CIENCIAS

CATÁLISIS Y SOCIEDAD: PASADO, PRESENTE Y FUTURO

INTRODUCCIÓN

El gran desarrollo industrial y tecnológico llevado a cabo por el hombre en las últimas décadas se ha traducido en una mejora de su calidad de vida; sin embargo ha supuesto un gran impacto perjudicial sobre el medio ambiente y la salud. El uso masivo e irresponsable de los recursos naturales por parte de la humanidad ha provocado la generación de gran cantidad de residuos, y su tratamiento inadecuado; entre otros factores, ha causado un importante deterioro de nuestro planeta.

Años atrás, el diseño industrial estaba basado exclusivamente en la optimización económica, sin tener en cuenta el medio ambiente; se consideraba que todos los subproductos de una operación química para los que no existe uso eran un residuo. La forma más práctica y económica de deshacerse de estos residuos consistía en quemarlos o verterlos en los diferentes ecosistemas. Actualmente existe una gran concienciación a nivel mundial para la conservación del Planeta Tierra, y el hombre ha puesto en marcha diferentes planes medioambientales para llevarlo a cabo.

Al principio los residuos se trataban antes de ser vertidos de manera que contaminaran lo menos posible. Sin embargo, este enfoque no resultó efectivo ya que los residuos se seguían acumulando en ciertas zonas y el tratamiento recibido no era el adecuado para evitar la contaminación. *La tendencia en la actualidad es la de minimizar las emisiones interviniendo directamente en el procedimiento industrial, previniendo y reduciendo, de esta manera, la generación de contaminantes* [1].

En particular, la industria química es una de las industrias más importantes y con una mayor repercusión en la contaminación ambiental. La química está presente en todo lo que nos rodea y gracias a ella disfrutamos de una mejor calidad de vida.

Para adaptarse a las medidas medioambientales reguladas para ayudar a la conservación del Planeta Tierra, las industrias químicas han optado por implantar la Química Verde o Química Sostenible.

La Química Verde fue definida por Anastas y Warner a principios de los años noventa como “*el diseño de productos y procedimientos químicos que permitan reducir y eliminar la utilización y la síntesis de sustancias peligrosas*” [2]. Para alcanzar este objetivo, la Química Sostenible se basa en doce principios: 1) prevención de generación de residuos, 2) maximizar la economía atómica, 3) metodologías de síntesis menos peligrosas, 4) diseño de compuestos químicos más seguros, 5) disminución del uso de sustancias auxiliares, 6) eficiencia energética, 7) utilización de materias primas renovables, 8) minimizar la derivación innecesaria, 9) potenciar la catálisis, 10) diseñar productos biodegradables, 11) desarrollar técnicas de análisis en tiempo real, y 12) minimizar el potencial de accidentes químicos (Figura 1).

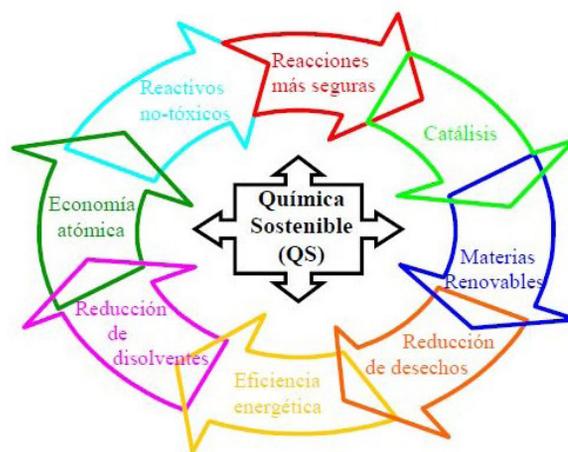


Figura 1. Visión general de los principios de la Química Verde y la estrecha relación que existe entre ellos.

Uno de los principios fundamentales de la Química Verde, es la catálisis –principio número 9– que juega un papel importante en el desarrollo de muchos procesos medioambientalmente compatibles: permite reducir el impacto medioambiental mediante la disminución de residuos y del gasto energético y disminuye el coste de los procesos simplificando al máximo las etapas de aislamiento y purificación de los productos de reacción, un aspecto fundamental para la industria.

CATALIZADOR: TIPOS DE CATÁLISIS

Entendemos por catalizador toda aquella *sustancia capaz de modificar la velocidad de una reacción química sin sufrir alteración alguna durante el proceso* [3].

¿Dónde reside entonces la importancia del uso de catalizadores en los procesos químicos? Muchas veces una reacción química que teóricamente debería producirse finalmente no tiene lugar o lo hace de una forma tan lenta y, en ocasiones, bajo condiciones tan extremas que no resulta viable ni técnica ni económicamente. Es en este punto donde entra en juego el uso de catalizadores; de forma general, rebajan la energía de activación del proceso modificando el mecanismo de la reacción (Figura 2).

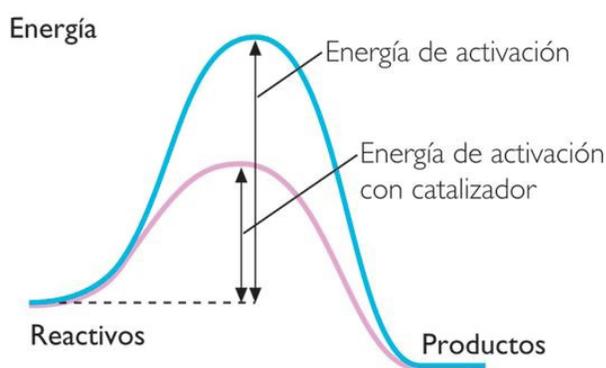


Figura 2. Efecto de un catalizador sobre la energía de activación en una reacción química (Fuente: <https://quimica-biologia-12-13.wikispaces.com/Biocatalizadores.+Enzimas,+vitaminas+y+hormonas>).

Por la tanto, los catalizadores son una herramienta indispensable en numerosos procesos; más de un 90% de los procesos químicos industriales en la actualidad llevan asociado el uso de catalizadores. Éste es el caso de las industrias de Química Fina en la síntesis de compuestos intermedios para la preparación de fármacos.

Se pueden distinguir dos tipos de catálisis principalmente: i) catálisis homogénea y ii) catálisis heterogénea, pudiéndose también diferenciar según el tipo de reacción en la que intervenga el catalizador en: iii) catálisis de oxidación-reducción, iv) catálisis ácido-base, v) catálisis enzimática o biocatálisis.

La catálisis homogénea es aquella en la cual el catalizador se encuentra en la misma fase que los reactivos involucrados en la reacción, mientras que la catálisis heterogénea se produce cuando aparece una diferencia de fases entre catalizador y reactivos. Aunque ambas han sido estudiadas ampliamente, la catálisis heterogé-

nea presenta ciertas ventajas frente a la homogénea. Sin embargo, cada una de ellas presenta una serie de características que las convierten en procesos óptimos para ser aplicados en distintos escenarios.

La gestión y eliminación de residuos son dos de los grandes problemas de más difícil solución en la industria química; en este ámbito la catálisis, en general, y la catálisis heterogénea, en particular, juegan un papel importante. Los catalizadores heterogéneos son mucho más robustos, con una mayor actividad catalítica y su nivel de toxicidad y acción corrosiva son considerablemente más bajos que el de los catalizadores homogéneos. Una de las principales ventajas del uso de catalizadores heterogéneos es la posibilidad de reutilización. A diferencia de lo que ocurre en la catálisis homogénea convencional, una vez concluida la reacción, los catalizadores heterogéneos se pueden separar de la mezcla de reacción y utilizarse nuevamente, manteniendo incluso, en algunos casos, su actividad catalítica, minimizando así los residuos producidos en la reacción.

EVOLUCIÓN HISTÓRICA DE LA CATÁLISIS

La catálisis ha estado presente en la vida del hombre desde la Antigüedad. Hace más de dos mil años que la humanidad utiliza la catálisis para obtener productos básicos como el pan, queso, vino, vinagre, jabón, etc., que se preparaban empleando porciones pequeñas de lotes anteriores.

El jabón procede de Oriente Medio, Babilonia; hace 5000 años, se preparaba por hidrólisis de grasas animales en presencia de cenizas de la madera, ricas en óxido de potasio, como catalizador.

La fermentación del vino es una de las reacciones catalíticas más antiguas utilizada por el hombre. Se trata de un proceso de catálisis enzimática, en el que la enzima *zimasa* transforma selectivamente los azúcares procedentes de la uva en alcohol. Esta enzima está presente en diferentes levaduras y es la responsable no sólo de la fermentación del vino, sino también de la cerveza, la leche, el arroz, etc.

La producción del pan empezó en la era del Neolítico; se preparaba sin fermentar, en forma de gachas, harina o tortas. Fueron los egipcios, hace más de 4000 años, los que incluyendo a la masa primaria un pequeño trozo de masa ya fermentada, que contenía la levadura que actúa como agente catalítico espumante, los que ob-

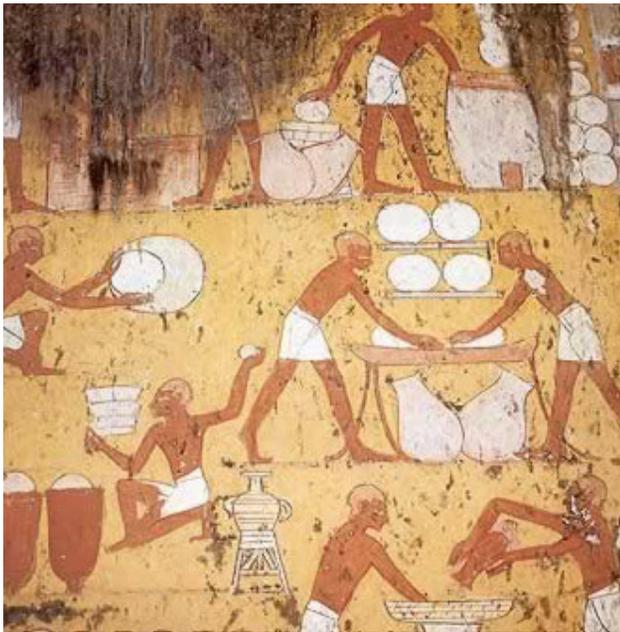


Figura 3. Egipcios elaborando pan (Fuente: <http://pinsapos-decristal.com>).

tuvieron un pan con una textura similar al que conocemos actualmente (Figura 3).

Por otra parte, una de las formas más comunes de fabricar queso es la acidificación de la leche por bacterias lácticas y complejos enzimáticos procedentes de los jugos digestivos de ciertos mamíferos. Esta forma de elaboración del queso se usaba cuando se domesticó la oveja, hace ya aproximadamente 3500 años.

En muchas ocasiones, el ser humano ha fabricado diversos productos haciendo uso de la catálisis sin ser consciente de ello. Ello se debe a que la catálisis, en todas sus modalidades, está ligada a la vida. De hecho, todas las reacciones químicas que tienen lugar en los seres vivos son procesos catalizados; *las enzimas son los catalizadores más potentes que se conocen* y se caracterizan por su carácter proteico, alto grado de especificidad, gran poder catalítico y, en general, actúan en condiciones suaves de reacción como son la temperatura de los seres vivos y el pH fisiológico.

El empleo de la catálisis ha contribuido también al desarrollo de la sociedad. Un ejemplo de ello es la contribución de Humphry Davy en 1817 (Figura 4), quien fue el inventor de las lámparas de minería. En 1815 recibió una carta de los mineros de Newcastle explicándole lo peligroso que era el gas metano y como el fuego producido, en algunas ocasiones, era propagado por las antorchas empleadas para iluminar las galerías [4].



Figura 4. Humphry Davy (1778–1829), descubridor de la incandescencia.

En este sentido, Davy observó que en la reacción de oxidación de compuestos orgánicos, en presencia de platino, se producía incandescencia, descubrimiento que años más tarde se aplicaría a la fabricación de lámparas de minería [5].

Hoy en día se investiga activamente en catálisis, como pone de manifiesto el gran número de artículos científicos que se publican diariamente sobre el tema. Sin embargo, no se trata de un término nuevo; en 1836, Jöns Jacob Berzelius, fue quien acuñó el término “catá-



Figura 5. Jöns Jacob Berzelius (1779–1848).

lisis” para describir aquellas reacciones químicas promovidas por sustancias que no se consumen durante un proceso químico y que, aparentemente, no intervienen en la reacción (Figura 5). Por entonces ya se conocían algunas reacciones catalizadas como son la transformación del almidón en glucosa, de etanol en ácido acético y de descomposición del agua oxigenada (H_2O_2), todas ellas promovidas por metales o diferentes agentes ácidos.

En 1909 Wilhelm Ostwald fue galardonado con el Premio Nobel en Química por sus investigaciones en catálisis y en los principios que gobiernan el equilibrio químico y las velocidades de reacción (Figura 6) [6].

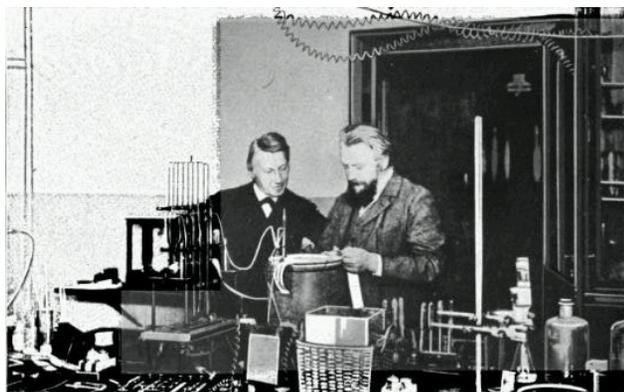


Figura 6. Wilhelm Ostwald (1853-1932) en el laboratorio.

Años más tarde, en 1912, Paul Sabatier obtuvo el Premio Nobel en Química por la descripción de un método para hidrogenar compuestos orgánicos en presencia de metales finamente divididos (Figura 7). Sus investigaciones en este campo sentaron las bases para la fabricación de margarinas por hidrogenación de aceite. Paul Sabatier fue el autor del primer libro de catálisis titulado “Catálisis en la Química Orgánica”, que sirvió como referencia para muchos científicos de la época.

En la segunda mitad del siglo XX tuvo lugar el gran desarrollo de la Química de la Coordinación y Organometálica y, con ello, el renacimiento de la Química Inorgánica, hasta entonces casi relegada al descubrimiento y la descriptiva de los elementos que, hoy en día, constituyen la tabla periódica. Dos hitos importantes en Química Organometálica son, por una parte, el descubrimiento del ferroceno por Geoffrey Wilkinson, en 1952 y, por otra, la polimerización de alquenos en presencia de catalizadores metálicos pertenecientes a la serie *d*, por lo que Karl Ziegler y Giulio Natta fueron galardonados con el Premio Nobel en Química en 1963 (Figura 8).

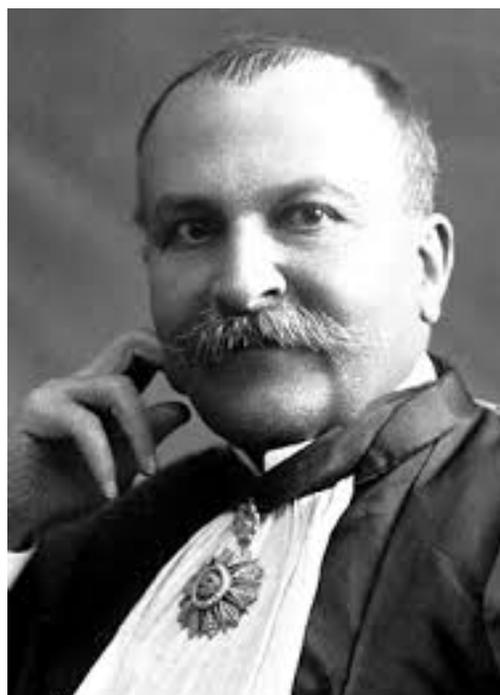


Figura 7. Paul Sabatier (1854-1941).

Años más tarde, ya en el siglo XXI, Yves Chauvin, Robert Howard Grubbs y Richard Royce Schrock compartieron el Premio Nobel en Química 2005 por el desarrollo de la reacción de metátesis de olefinas en presencia de complejos organometálicos de Ru y Mo. La metátesis de olefinas es de gran importancia para la industria química para la síntesis de medicamentos y plásticos de forma barata, eficaz y ecológica.

Louis Pasteur es considerado como el fundador de la estereoquímica; fue el primero en asegurar que la mayoría de los sistemas biológicos tienen preferencia por una forma estereoquímica sobre otra. La quiralidad y la simetría están presentes en la naturaleza tanto que, a me-

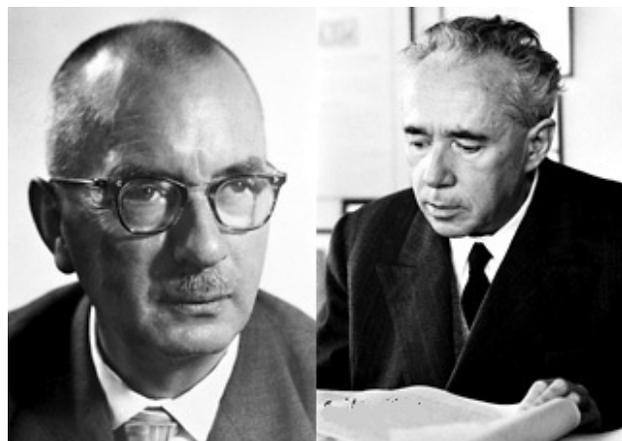


Figura 8. Karl Ziegler (1898-1973) y Giulio Natta (1903-1979), Premio Nobel en Química en 1963.

nudo, un determinado compuesto existe en todas sus formas quirales presentando propiedades diferentes. En este sentido, la quiralidad es de gran importancia para la industria farmacéutica ya que, con frecuencia, tiene una importante repercusión clínica [7]. En esta misma línea, más de 150 años después del descubrimiento de Louis Pasteur, William Standish Knowles, Karl Barry Sharpless y Ryoji Noyori compartieron el Premio Nobel en Química (2001) por sus trabajos sobre las reacciones de oxidación e hidrogenación estereoselectivas, empleando catalizadores quirales, para la producción de fármacos enantioméricamente puros.

La formación de enlaces C-C es de gran relevancia en síntesis orgánica y un requisito indispensable para la vida en la tierra; gracias a este tipo de procesos se pueden crear moléculas de gran complejidad estructural y sofisticación. Entre las reacciones de formación de enlaces C-C destacan la reacción de Grignard (1912), de Diels-Alder (1950), y la reacción de Wittig (1979), todas ellas premiadas con el Premio Nobel en Química en su momento. Más recientemente, en el año 2010, los profesores Richard Fred Heck, Eiichi Negishi y Akira Suzuki

fueron galardonados con el Premio Nobel de Química por sus estudios sobre las reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por Pd (ver [100@uned](#), nº4 (2011), 101-103). La metodología desarrollada por estos investigadores, de reconocido prestigio internacional, se ha empleado por numerosas multinacionales farmacéuticas para la síntesis de nuevos fármacos, entre los que destaca el SB242784, desarrollado por SmithKline Beecham, para el tratamiento de la osteoporosis [8].

No podemos dejar de citar aquí los estudios realizados por los investigadores Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel, sobre Química Computacional, por los que recibieron el Premio Nobel en Química en 2013 (ver [100@uned](#), nº6 (2013), 118-120). En la década de 1970, los profesores Karplus, Michael y Warshel sentaron las bases para los programas de gran alcance que se utilizan para entender y predecir los procesos químicos. Los modelos que se obtienen reflejan la vida real y su utilización se ha convertido en crucial para la mayoría de los avances en la Química actual, particularmente en catálisis (Figura 9) [9].

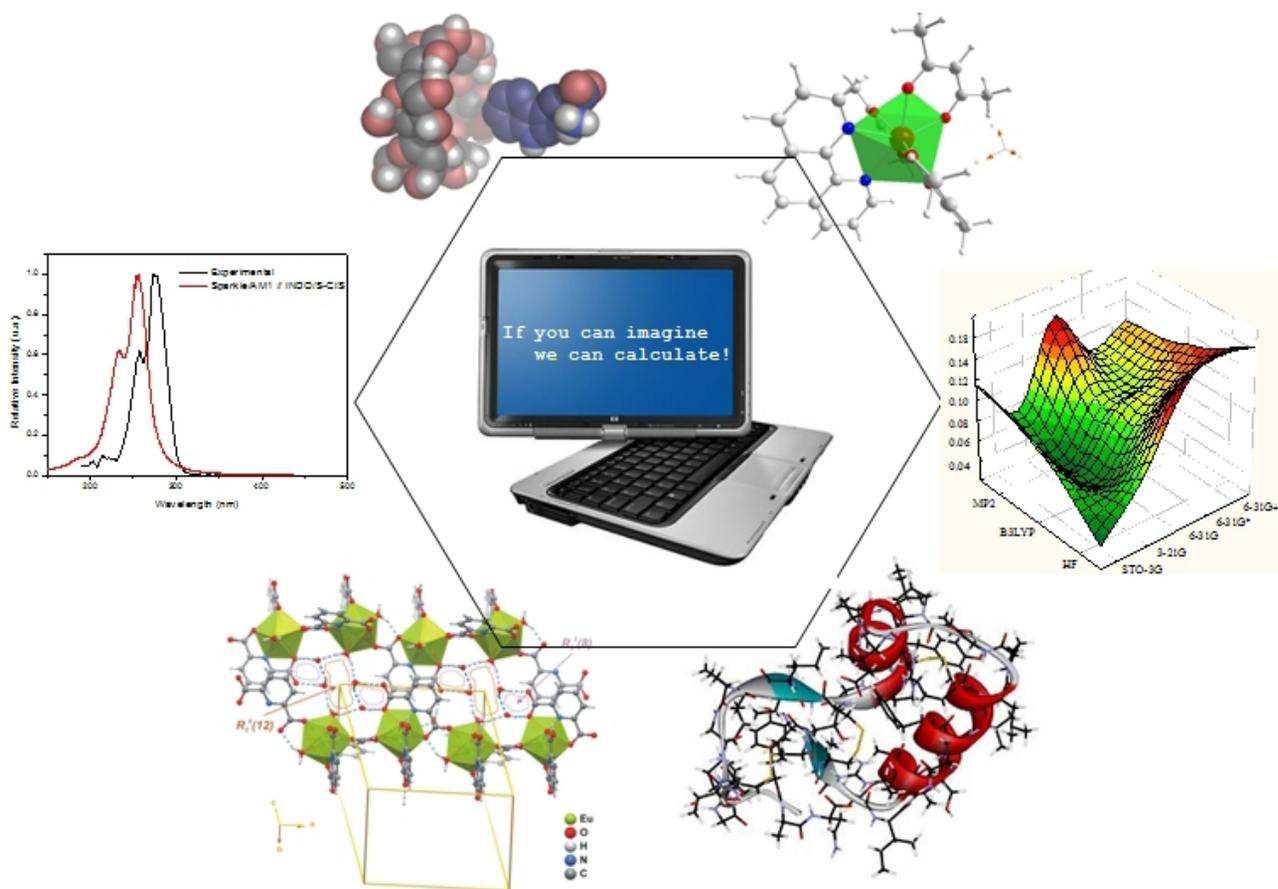


Figura 9. Distintos modelos moleculares obtenidos mediante Química Computacional (Fuente: A. Fernandes (2013), Ciencia Elemental, 1(1): 1-3).

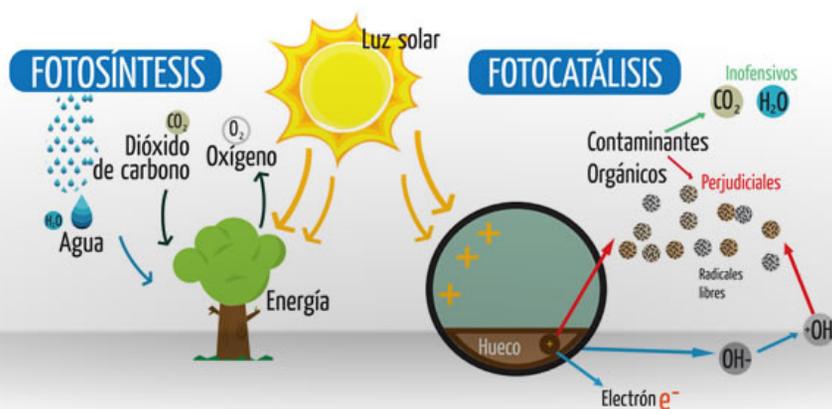


Figura 10. Comparación entre los procesos de fotosíntesis y fotocatalisis (Fuente: http://adnatech.mx/nanotech_03.php).

TENDENCIAS ACTUALES EN LA CATÁLISIS

Tal y como ya se ha comentado, el uso de catalizadores es de suma importancia para la vida y el desarrollo y avance de la sociedad. Entre las contribuciones más recientes de la catálisis a la sociedad destaca el empleo del Ti_2O en la fabricación de cementos fotocatalíticos auto-limpiantes. En estos materiales el Ti_2O que actúa como fotocatalizador y es capaz de transformar, con la ayuda de la energía solar, sustancias nocivas tanto orgánicas como inorgánicas, presentes en el aire fruto de la actividad humana, en sustancias inocuas. Este tipo de materiales de construcción ya se han empleado en la Ciudad de la Música y Bellas Artes en Chambéry (Francia) o en la Iglesia Rico en Misericordia en Roma (Italia), entre otras edificaciones de nueva generación [10].

Es importante mencionar en este punto que los sectores industriales relacionados con la catálisis son el refinado del crudo de petróleo, la producción de materias primas y el control de emisiones. Sin embargo, actualmente una parte importante de la industria química se dedica a la producción de compuestos de alto valor añadido con aplicación en las industrias de química fina, entre ellas la industria farmacéutica, cosmética y agroalimentaria, en las que la catálisis tiene un papel fundamental. Actualmente, más del 60% de la síntesis química y del 90% de las transformaciones químicas en las industrias utilizan catalizadores. En este sentido, la catálisis tiene gran impacto económico. De acuerdo con la Sociedad Norteamericana de Catálisis, la catálisis y los procesos catalíticos representan casi el 20% del PIB de Estados Unidos y aproximadamente el 35% del PIB mundial [11].

Son muchos los informes y artículos científicos en los que investigadores de reconocido prestigio internacional opinan sobre el futuro de la Química de forma general [12]. En la mayoría de estas publicaciones se hace mención directa o indirecta a la Ciencia de los Materiales y su aplicación en materia de comunicación y transporte, salud y medioambiente, hoy en día objetivos prioritarios del Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016 [13]. Tanto es así que la Química, en general, y la Ciencia de los Materiales, en particular, en la que está englobada la catálisis, ocupan un lugar importante en el Programa Estatal de I+D+I Orientada a los Retos de la Sociedad.

Cabe destacar que en el número inaugural de la revista *Nature Chemistry* en 2009 ocho químicos, líderes en sus campos de investigación, reflexionan acerca del futuro de la Química en el siglo XXI. Todos coinciden en que la Química afronta grandes retos en este siglo, entre los que se encuentra el desarrollo sostenible global que preserve nuestro entorno y nuestra vida. *Los Profesores Noyori y Clark sostienen que la catálisis seguirá siendo uno de los campos más importantes en investigación, ya que es la única manera racional de producir compuestos de forma económica, ecológica y con menor coste energético.* Subrayan, además, la importancia que va a tener la “Química Verde” en los próximos años, no sólo para la Química como disciplina, sino para el mundo en general [12,14]

Por último, el profesor Harry B. Gray, del Instituto de Tecnología de California, concluye: “*Hemos estado quitándole recursos a la naturaleza desde el principio de los tiempos, consumiendo el petróleo, gas y carbón que nos han sido dados tras miles de millones de años de fotosín-*



Figura 11. Importancia de la Química responsable para el medio ambiente (Fuente: <https://coloide.wordpress.com/2012/07/13/quimica-verde-los-retos-del-lado-mas-verde-de-la-quimica/>).

tesis. *Éste es el siglo en la Historia en el que la Humanidad empezará a devolver la deuda con el capital generado a través de la Investigación Fundamental en Química* (Figura 10) [15].

Finalmente, decir que en 1948 A. Mittasch dijo que la “Química sin catálisis, sería como una espada sin mango, una luz sin brillo, o una campana sin sonido”. Esta declaración es tan cierta hoy como lo fue en 1948 (Figura 11) [16].

REFERENCIAS

[1] S. E. Manahan (2003). *Introducción a la química ambiental*. Ed. Reverté.

- [2] P.T. Anastas, T.C. Williamson (Eds.) (1996). *Green Chemistry: Designing Chemistry for the Environment*. Ed. American Chemical Society.
- [3] J.F. Izquierdo, F. Cunill, J. Tejero, M. Iborra, C. Fité (2004). *Cinética de las Reacciones Químicas*. Ed. Universitat Barcelona.
- [4] http://www.bbc.co.uk/history/historic_figures/davy_humphrey.shtml.
- [5] J.M. Thomas, W.J. Thomas (1996). *Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis*. Ed. Wiley.
- [6] W. Ostwald, *Z. Phys. Chem.* 15 (1894) 705.
- [7] L.A. Nguyen, H. He, C. Pham-Huy, *Int J Biomed Sci.* 2 (2006) 85.
- [8] M. García Melchor, “A Theoretical Study of Pd-Catalyzed C-C Cross-Coupling Reactions”, Ed. Springer, 2013.
- [9] <http://www.elperiodico.com/es/noticias/ciencia/karplus-levitt-warshel-ganan-nobel-quimica-2732170>.
- [10] M. Faraldos (2012). *Guía Práctica de la Fotocatálisis Aplicada a Infraestructuras Urbanas*. Congreso Nacional del Medio Ambiente CONAMA 2012, Asociación Ibérica de Fotocatálisis.
- [11] *Catalysis - A key technology for sustainable development*. Catalysis Science & Technology. <http://catl.sites.acs.org/>.
- [12] R. Noyori (2009). *Nature Chemistry* 1, 5.
- [13] http://www.idi.mineco.gob.es/stfls/MICINN/Investigacion/FICHEROS/Plan_Estatal_Inves_cientifica_tecnica_innovacion.pdf.
- [14] J.H. Clark (2009). *Nature Chemistry*, 1, 12.
- [15] H.B. Gray (2009). *Nature Chemistry* 1, 7.
- [16] S.D. Jackson (2011) *Catalysis Science & Technology*. 1, 855.

Marina Godino Ojer
Daniel González Rodal
Vanessa Calvino Casilda
Elena Pérez Mayoral

Dpto. de Química Inorgánica y Química Técnica