

La química al revés: invirtiendo en la química

Margarita I. Bernal Uruchurtu
Centro de Investigaciones Químicas
Miembro de la Academia de Ciencias de Morelos

La preocupación por la preservación del medio ambiente, por el calentamiento global, por la contaminación de aire, agua y suelos y por la acumulación de desechos que no se pueden aprovechar es un signo de nuestros tiempos. Por ello, hemos aprendido a apreciar el valor que la creatividad e y el ingenio tienen cuando encontramos una forma de reutilizar las bolsas de plástico, las botellas de refresco, el papel ¿o no es así? Pero, si tenemos pelusas de papel que esparció el aire ¿podremos reutilizarlas? Más o menos así es el problema que queremos presentar hoy.

En los laboratorios químicos se sabe que, en general, el precio de los reactivos que se usan para fabricar moléculas útiles como fármacos depende del potencial de esa molécula para ser transformada en algo de mayor valor económico. Un ejemplo común, conocido por prácticamente todos es el precio de los combustibles; su valor está determinado por las aplicaciones que tienen. No vale lo mismo un combustóleo que una gasolina para avión. El primero es un aceite muy denso que casi parece chapopote y que en algunas industrias todavía se usa para calentar calderas u hornos, mientras que el segundo es un combustible ligero cuya combustión es eficiente y completa en los motores de avión. No obstante, resulta importante saber que ambos serán convertidos en, prácticamente los mismos desechos: bióxido de carbono y agua.

Cualquier combustible de origen fósil, un hidrocarburo, tiene en su fórmula Carbono e Hidrógeno en diferentes proporciones. Al quemarse, reacciona con el oxígeno presente en el aire y su molécula se fragmenta, idealmente hasta las piezas más simples, moléculas que contienen un único átomo de carbono, el bióxido de carbono CO_2 mientras que los átomos de hidrógeno formarán con el oxígeno moléculas de agua, H_2O .

La operación de las sociedades modernas tiene actualmente una relación odio-amor con los combustibles fósiles: los ama porque prácticamente la totalidad de los medios de transporte dependen de ellos; los detesta porque sabe que su control está en manos de pocos países o empresas que controlan su precio y han inundado el mercado de combustibles de muy diversas calidades. Pero, lo más grande es que una vez que se quemaron, producen uno de los gases responsables del calentamiento de la atmósfera terrestre el CO_2 . Y por las cantidades en que esto ha ocurrido en los últimos cien años, es señalado como el principal responsable de esta catástrofe global.

Si dejáramos de lado ese enorme *detalle* veríamos también que, una vez que la combustión terminó, los gases desprendidos como productos, son como las pelusas de papel dispersas: de poco o nulo valor comercial y un problema de contaminación por quedar esparcidos en el medio ambiente. ¿Hay algo que hacer? ¿A alguien creativo e ingenioso se le ocurrirá como aprovecharlas? Demos un vistazo a la historia y veamos la tarea que equipos de químicos en todo el mundo está haciendo.

Alemania después de la Primera Guerra Mundial

Este país europeo no tiene en su territorio ningún yacimiento petrolero del que echar mano para producir combustible. Durante la revolución industrial del siglo XIX, Alemania aprovechó las numerosas minas de carbón mineral que se encontraban principalmente en el lado occidental, para hacer funcionar su industria. Sin embargo, el desarrollo de mejores tecnologías basadas en hidrocarburos líquidos, hizo necesario encontrar una fuente para estos combustibles. En 1924, dos químicos del Instituto de Química del Rey Guillermo II, Franz Fischer y Hans Tropsch, optimizaron un proceso descubierto veinte años antes en Francia con el que podían convertir el monóxido de carbono en metano al hacer reaccionar al primero con hidrógeno

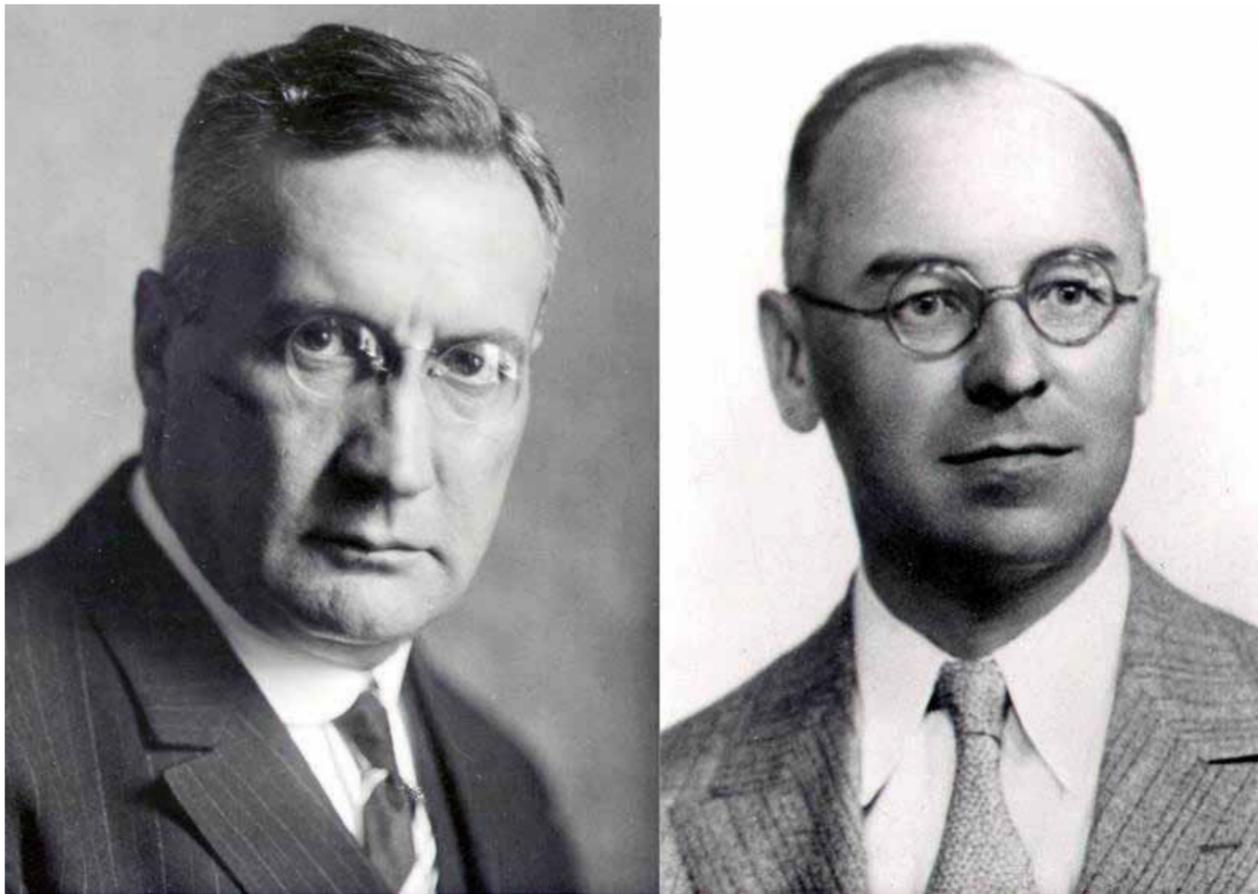


Figura 1. El Prof. Franz Fischer y el Dr. Hans Tropsch, los inventores del proceso para crear hidrocarburos líquidos a partir de monóxido de carbono e hidrógeno. Tomado de: <https://www.mpg.de/511447/fischer-tropsch-synthesis-2005>

empleando níquel o cobalto para acelerar la reacción (catalizadores). En Alemania emplearon hierro para acelerar el proceso que, aunque no era tan efectivo como el níquel, porque se desactivaba rápidamente, era accesible y barato.

Fischer y Tropsch consiguieron varias patentes sobre este proceso, muchas de ellas relacionadas con modificaciones para mejorarlo. La riqueza que representaba el carbono mineral -que cada vez era menos deseable como combustible- se convirtió en una ventaja estratégica. Al quemarlo en presencia de poco oxígeno se produce el monóxido de carbono que se activa en una superficie metálica lo que hace más fácil su reacción con el hidrógeno. Los productos de esta reacción serían entonces el CH_4 y una molécula de H_2O .

Mientras el metal que funciona como catalizador esté activo, el metano puede seguir reaccionando con otras moléculas de CO y aumentar el tamaño de la cadena de hidrocarburo. En la figura 2 se muestra un esquema muy simplificado de este proceso. Al parar la reacción se obtiene una mezcla de hidrocarburos y alcoholes que se utilizaron como combustibles de reemplazo en la segunda guerra mundial.

En efecto, al inicio de la guerra, Alemania tenía ya en operación cuatro plantas capaces de producir 200 mil toneladas al año de combustibles. Se calcula que ellas fueron proveedoras de al menos el 9% del combustible necesario para los tanques de guerra y el 25% para mover los automóviles y vehículos de transporte. Al final de la guerra, ya contaban con 9 plantas que usaban este proceso y alcanzaban a generar 700 mil toneladas del combustible basado en esta mezcla de hidrocarburos y alcoholes.

Como se pueden imaginar, contar con un proceso capaz de hacer combustibles útiles es económicamente interesante, sobre todo en condiciones en las que las reservas de combustibles fósiles disminuyen o están políticamente comprometidas. Más allá de una gasolina útil pero de baja calidad, la química de este proceso abrió muchas puertas al desarrollo de la industria química.

Catalizadores: los atajos de la química.

Un catalizador es una sustancia que interviene en una

reacción facilitando la ruptura y/o formación de enlaces químicos con un menor costo energético. Imaginemos que algunos de estos catalizadores interactúan con la "molécula inerte" fijándola en una posición en la que podrá ser atacada específicamente por otra molécula para formar un enlace. Es posible que la imagen mental del proceso parezca agresiva pero, ¡al contrario! Al facilitar la reacción, no es necesario ni calentar a altas temperaturas o usar grandes presiones para forzar la reacción. Se requiere menos energía y se obtiene más producto, más rápido. Aún cuando el mecanismo exacto de la forma en la que lo hacen es difícil de conocer, se sabe que los procesos de síntesis con catalizadores ocurren a través de etapas sucesivas con muchos intermediarios. También se ha encontrado que, tal como Fischer y Tropsch lo hicieron notar, no todos los metales son catalizadores efectivos para el mismo proceso. Si se considera que el rendimiento del proceso con hierro es, en una escala arbitraria, igual a 1; con níquel será 250, con cobalto 1000 y con rutenio 48000. Con ello y con otros factores como la presión del hidrógeno; la cantidad que se agrega de otros promotores o la presencia de contaminantes en el reactor del proceso, se han generado muchas opciones para obtener combustibles, plásticos, materias primas de la industria farmacéutica, por citar algunos.

Los nanocatalizadores: nuevos comportamientos

El calentamiento global, la realidad catastrófica que nuestra adición a los combustibles fósiles ha causado, podría atenuarse con el desarrollo de procesos basados en nanopartículas. Este año los principales titulares de las noticias científicas nos contaban del descubrimiento que un grupo de químicos en el Laboratorio Nacional de Oak Ridge hizo: empleando bióxido de carbono como materia prima y un nanocatalizador de cobre, obtuvieron etanol (el alcohol que se obtiene también en la fermentación de azúcares por levaduras y es contenido en las bebidas alcohólicas). El proceso descubierto, recupera el residuo de la combustión, el CO_2 , y lo convierte en una molécula con gran potencial en química. Usando la analogía inicial, sería atrapar las pelusas y armar con ellas hojas de papel blanco de gran calidad. El grupo en Oak Ridge, como muchos otros en el mundo, tenía décadas estudiando el proceso. Probaron ha-

Química del futuro

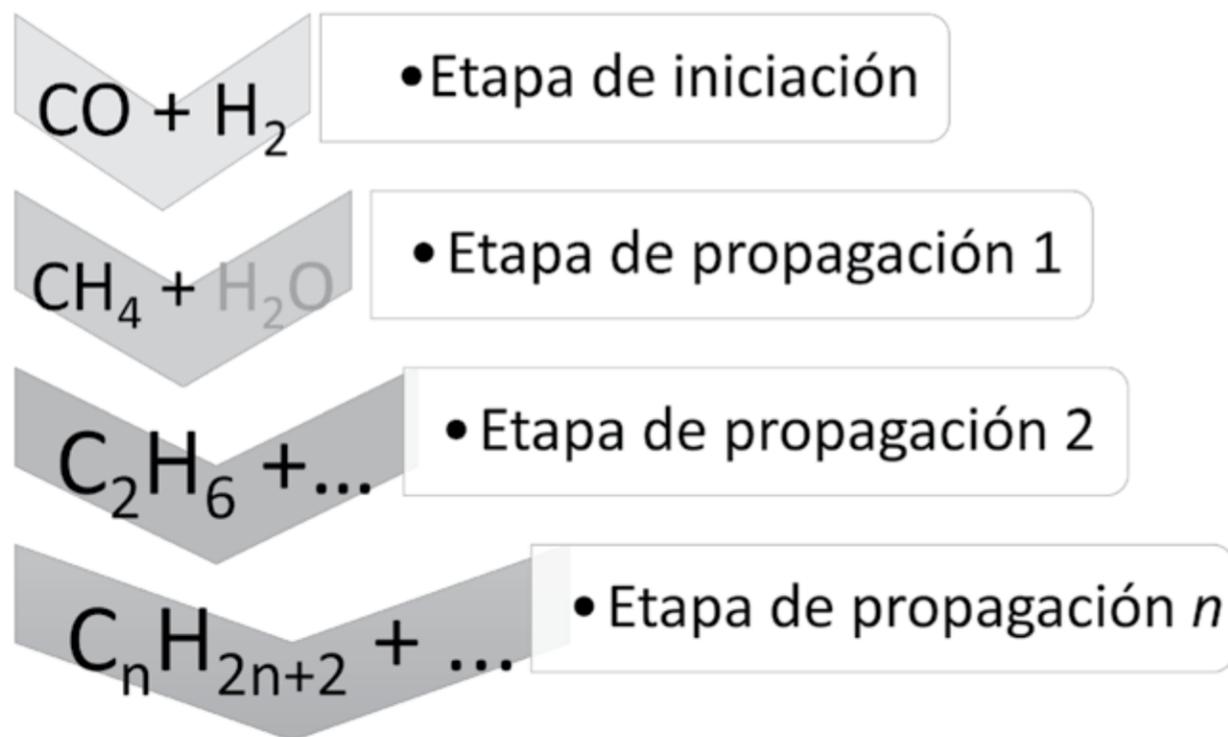


Figura 2. Esquema simplificado de la reacción de transformación de monóxido de carbono (CO) en combustibles.

cer la reacción con muchos metales diferentes y sabían que el cobre es uno de los mejores catalizadores y su costo no es muy alto. Sin embargo, los resultados anteriores eran mezclas de una enorme cantidad de productos y las cantidades de etanol eran tan bajas (< 9%) que el proceso no tenía ningún interés práctico. El estudio detallado de esta reacción les permitió darse cuenta que si el catalizador era una placa metálica o pequeñas esferas cubiertas de cobre o cristales pequeños del metal, la proporción relativa de los productos de la reacción era muy diferente. Así que decidieron probar el efecto que tendría colocar cantidades pequeñísimas de cobre en diferentes materiales. Una de las características fundamentales de los procesos de catálisis, es que el área del catalizador expuesta a los reactivos juega un papel primordial en la velocidad de reacción; por ello probaron en una estructura basada en grafeno¹ en la que algunos de los átomos de carbono se reemplazaron por nitrógeno, dando lugar a estructuras que vistas al microscopio parecen erizos... muchas agujas pequeñísimas que resultan en un material con gran cantidad de área útil disponible para la reacción. Al depositar el cobre sobre estas nanopúas

1 <http://www.acmor.org.mx/?q=content/grafeno-viejo-conocido-y-%C3%A9xito-actual-en-lanantotecnolog%C3%AD>

(una microfotografía de ellas se muestra en la figura 3) se llevaron una gran sorpresa: el rendimiento de la producción de etanol a partir de CO₂ alcanzó rendimientos superiores al 60% y a veces tan altos como el 80%. Aunque a la fecha no se conoce exactamente cómo ocurrió la reacción, hay indicios claros de que el efecto catalítico del cobre se ve aumentado por el efecto catalítico mismo del material de grafeno con nitrógeno que usaron como

soporte. Probablemente se trate de un efecto sinérgico que resulta de encontrar un arreglo en el que los dos sistemas catalíticos se apoyan unos a otros.

Recuperar las piezas útiles: estrategias de química verde

Una de las formas que los científicos tienen para compartir sus resultados y las ideas acer-

ca de proyectos en desarrollo es a través de seminarios y conferencias. La semana pasada nos visitó aquí en la UAEM, el Dr. Juventino García Alejandro, investigador de la Facultad de Química de la UNAM. En su charla mostró la forma en la que algunos compuestos metálicos realizan actividades catalíticas. Las características de estos catalizadores, a diferencia de los metales que se usaron en los ejemplos anteriores, es que sólo pocos átomos metálicos (de hecho solo uno o dos), son parte de la estructura del catalizador y por ello el efecto catalítico es diferente cuando hay muchos de ellos. Además, otros grupos químicos unidos a los centros metálicos pueden modular la actividad del catalizador. Entre los ejemplos que Juventino nos mostró destacó uno en especial: emplear compuestos con níquel que se unen selectivamente al CO₂ y lo activan para así unirlos a otros fragmentos moleculares y generar moléculas de gran valor estratégico en la síntesis de fármacos y otras moléculas útiles. Aquí hay otro ejemplo de utilizar un material de desecho y convertirlo en algo de gran valor agregado.

Sin duda alguna el campo de la catálisis química es uno de los espacios académicos de donde esperamos procesos que se puedan aplicar en gran escala para generar aplicaciones útiles para disminuir la cantidad de residuos y con ello colaborar en problemas urgentes. La investigación que se hace en México sobre ese tema ha conducido a patentes importantes que podrían convertirse en ventajas tecnológicas en muchas áreas.

<http://bibliotecadigital.ilce.edu.mx/sites/ciencia/volumen2/ciencia3/059/htm/cataliza.htm> Gavilán, Arturo, Yarto, Mario, Martínez, Miguel Ángel, La química verde en México Gaceta Ecológica [en línea] 2004, (julio-septiembre) : [Fecha de consulta: 1 de diciembre de 2016] Disponible en: <http://www.redalyc.org/articulo.oa?id=53907203> ISSN 1405-2849

Catalizadores. ¿La piedra filosofal del siglo XX?, Sergio Fuentes y Gabriela Díaz, 2ª ed. Col. La Ciencia para Todos, 1997. ISBN 968-16-5233-9

[Fecha de consulta: 1 de diciembre de 2016] Disponible en: <http://bibliotecadigital.ilce.edu.mx/sites/ciencia/volumen2/ciencia3/059/htm/cataliza.htm>

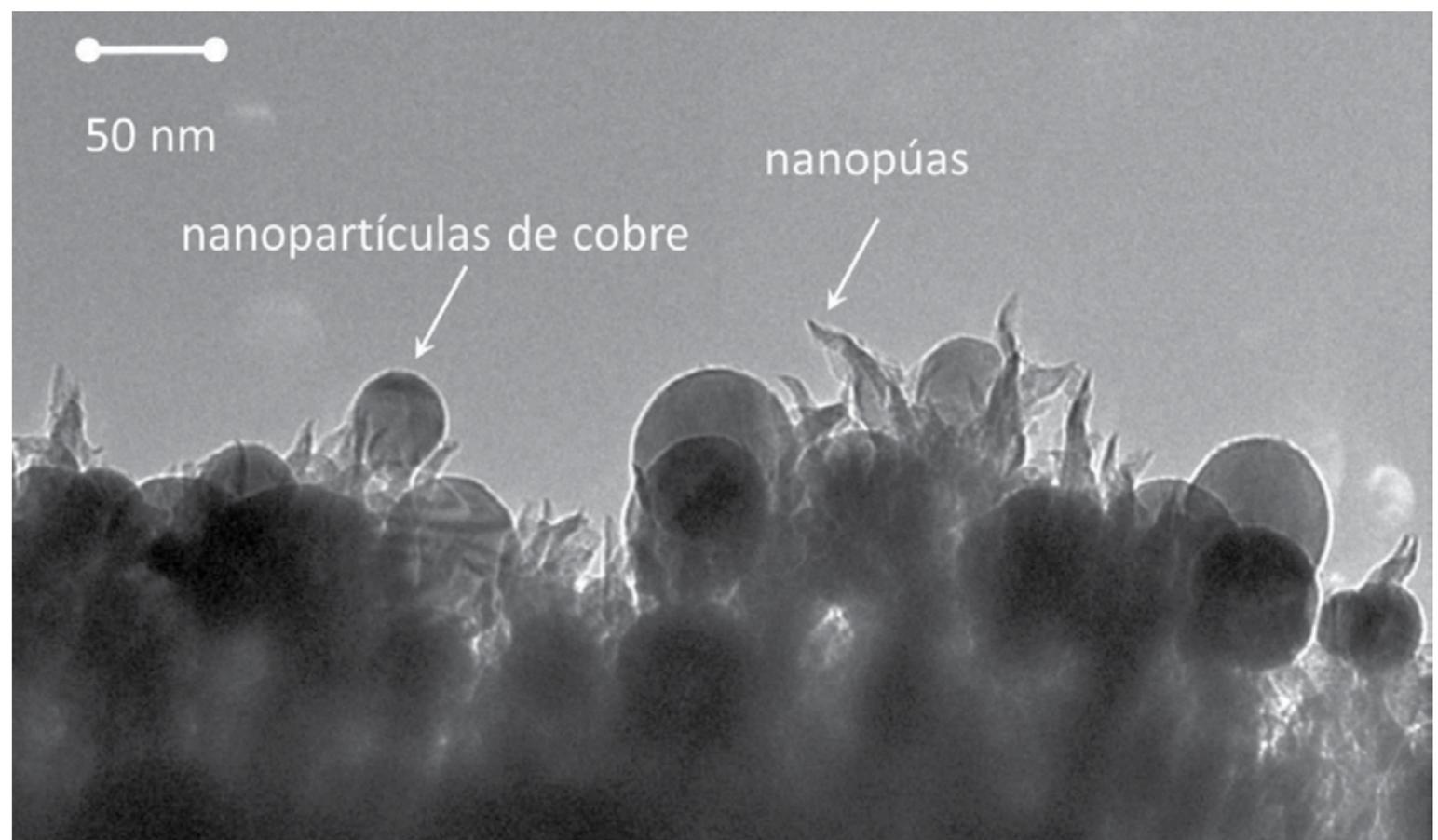


Figura 3. Fotografía de alta resolución de una muestra de las nanopúas de carbono dopadas con nitrógeno y las partículas de cobre depositadas sobre ellas tomada con el microscopio de transmisión electrónica. (Tomada del artículo de Song et al. DOI: 10.1002/slct.201601169)