

Un món material avançat i sostenible.

La recerca en química

Miquel Duran

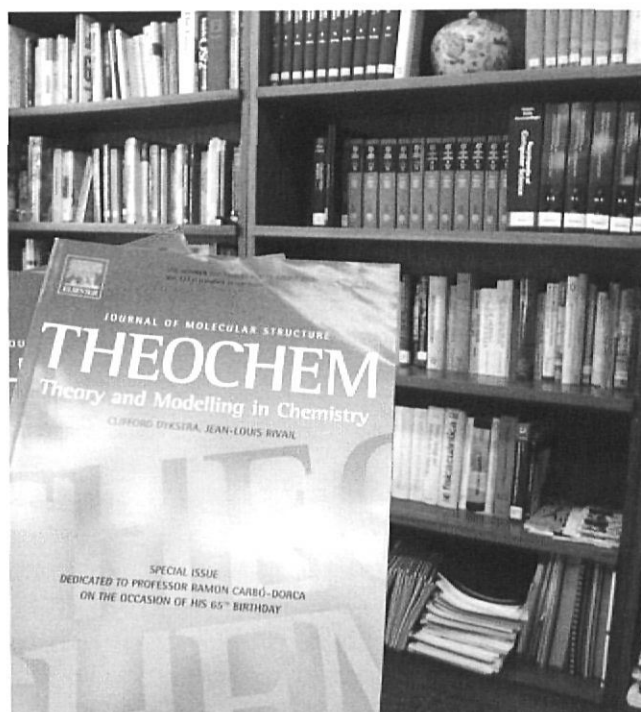
En els darrers anys la nostra societat està esdevenint una societat del coneixement, on sembla que aquest ha de ser el principal actiu que convé comprar i vendre. Però el nostre món és un món material, i la producció i el disseny d'allò que es pot tocar i remenar segueix essent un element primordial en la societat. En aquest sentit, el paper de la química, com a ciència innovadora, no es limita a observar la natura, sinó que la intenta transformar. Constantment se sintetitzen noves molècules, es dissenyen nous materials i es milloren processos ja existents.

Ja que possiblement dintre de 25 anys els principals problemes de la humanitat segurament seran l'energia i el menjar, la química podrà contribuir a resoldre'ls dissenyant combustibles eficients i renovables i sintetitzant aliments de tots tipus. Fins i tot sembla un crim contra el futur extreure petroli i cremar-lo, no tan sols per l'escalfament global del planeta, sinó perquè es cremen materials que són tremendament valuosos perquè són difícils de crear al laboratori.

Els reptes als quals s'enfronta la química del segle XXI demanen un gran esforç per part de la societat, i per tant dels investigadors. Afortunadament, la globalització de la recerca és efectiva i es pot contribuir a avançar en el coneixement des d'una universitat petita com la de Girona. De fet, els investigadors del Departament de Química de la UdG combinen la ciència aplicada, aquella que és conduïda per les necessitats immediates i l'aplicabilitat directa, amb la ciència bàsica, aquella que és conduïda per la curiositat. En aquest article precisament es pretén donar unes pinzellades de les principals línies de recerca que desenvolupen els cinc grups de recerca en què s'agrupen els més de seixanta investigadors del Departament de Química de la UdG.

LA NANOTECNOLOGIA

Com s'ha dit abans, aquest és un món material, i per tant els químics intenten crear nous materials, que poden ser formats de peces grosses i molt complicades o tenir petites peces senzilles. La nanotecnologia (i la nanociència) estan esdevenint les peces clau de la innovació al segle XXI; construir nanomàquines (per exemple, rotors moleculars) o ordinadors basats en molècules són





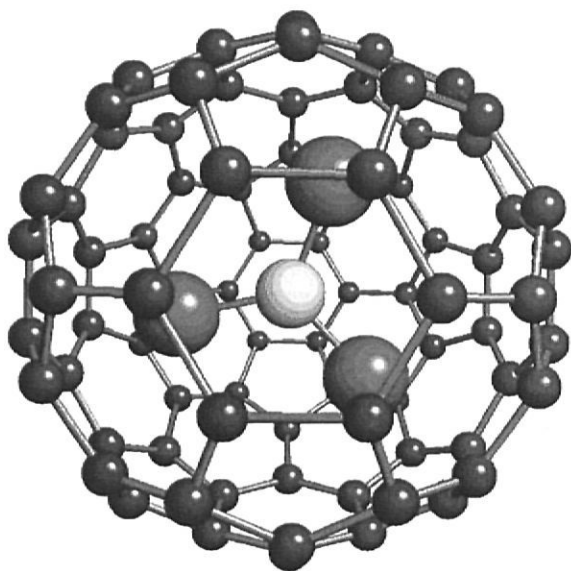
grans reptes de futur on la química tindrà un paper actiu. Una contribució innovadora dels nostres investigadors, mitjançant la simulació per conjunts d'ordinadors de gran potència, són els estudis teòrics de les propietats òptiques no lineals de materials d'interès en el camp de les telecomunicacions: les molècules que presenten aquestes propietats permeten desviar un feix de llum en presència d'un camp elèctric. El seu disseny enginyós obre la porta al control de la direcció dels feixos de llum per aplicació de camps elèctrics, la qual cosa té moltes aplicacions en el camp de les telecomunicacions, per exemple per dissenyar nanodispositius òptics que facin molt ràpida la Internet, o per crear memòries òptiques que permetin emmagatzemar grans quantitats de dades. Els nostres investigadors estudien també d'altres materials innovadors, com els derivats del futbolè, una molècula amb forma de pilota de futbol, o molècules que es fiquen a dins d'una altra, com per exemple la d'un complex d'escandi, nitrogen i carboni, on la molècula de SC_3N està dins d'una gàbia de C_{60} .

Una línia de recerca que està agafant importància és la de caracterització i mesura; per exemple, cada cop més es treballa a dissenyar sensors que permetin detectar, si pot ser a distància, substàncies potencialment agressives. En aquest camp són especialment innovadors els sensors, que són dispositius de mida petita que responen a determinats paràmetres químics o físics de manera directa i a temps real. El seu ús també està molt estès en el camp de l'anàlisi mediambiental i l'anàlisi clínica, entre d'altres. Al nostre departament també s'investiga sobre sensors, sempre a

un nivell molt pacífic, que responguin a espècies inorgàniques que es trobin en solucions aquoses. Per un cantó, s'han desenvolupat sensors de tipus òptic, que es basen en el canvi en l'espectre d'absorció d'indicadors àcid-base acolorits, produït quan l'espècie que es monitora, per exemple un anió o catió, es posa en contacte amb una membrana que conté a més un reactiu selectiu per a l'analit. Per un altre cantó, es treballa en sensors electroquímics, que mesuren la diferència de potencial que s'estableix entre les dues cares de la membrana sensora que ha de contenir també, igual que per als sensors òptics, un reactiu que interaccioni de manera selectiva a l'espècie que es vol monitorar.

Lligant amb els sensors, també es duen a terme al departament altres recerques relacionades amb el medi ambient. L'estudi de la distribució dels contaminants (compostos orgànics i metalls) requereix l'anàlisi d'aigües, sediments, sòls i biota. La determinació de microcontaminants presenta dificultats, ja que sovint cal l'ús de tècniques molt sensibles i mètodes laboriosos que inclouen etapes d'extracció i concentració. Als nostres laboratoris es treballa en el desenvolupament de metodologia analítica que s'ha aplicat al seguiment de plaguicides i metalls en aigües, sediments, sòls i peixos en diferents zones: Aiguamolls de l'Empordà, conca del riu Ter i Ter Vell. Igualment s'investiguen els mecanismes de transport dels contaminants per tal de predir el destí final d'aquests en el medi. Així, per exemple, s'estudia el transport d'herbicides a través de la zona no saturada del sòl en camps de golf, i la transferència de metalls continguts en residus de mineria al medi hídic i als organismes vius.





Molècula de $SC_3N@C_{60}$ derivat del futbolè, amb forma de pilota de futbol.

UNA CIÈNCIA VERDA

Un dels reptes que es marca la química del segle XXI és esdevenir una ciència verda, una ciència on no es contami, on no es generin residus, i on es promogui la sostenibilitat i la responsabilitat. Un aspecte medioambiental de la investigació química gironina està relacionat amb la biotecnologia. Disminuir la quantitat de diòxid de carboni a l'atmosfera és un somni de molts científics, i un compromís dins del protocol de Kioto. Als nostres laboratoris hi contribuïm creant complexos metàl·lics que puguin extraure CO_2 . Un complex de coure sintetitzat conté un lligand dissenyat de tal manera que permet estabilitzar el grup Cu-OH terminal extraordinàriament reactiu. A més, reacciona amb CO_2 , per la qual cosa és molt interessant des del punt de vista medioambiental a causa de les seves implicacions en l'efecte hivernacle. Aquest cas fa referència a la coordinació d'anions a lligands macrocíclics. Complexos que porten al món de la química supramolecular, on es generen complexos entre molècules, unides entre elles, sense enllaços covalents, tot controlant el grau d'atracció entre elles. Aquesta branca de la ciència està cridada a tenir un espectacular desenvolupament en els propers anys.

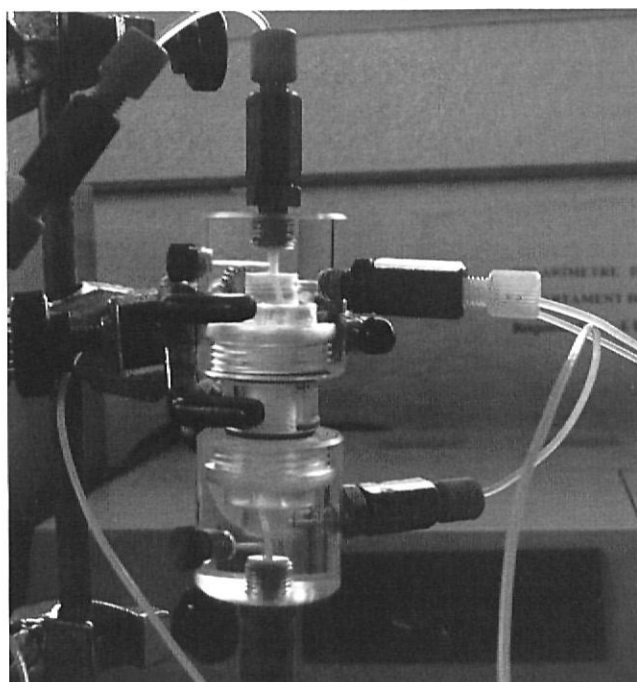
QUÍMICA I ALIMENTACIÓ

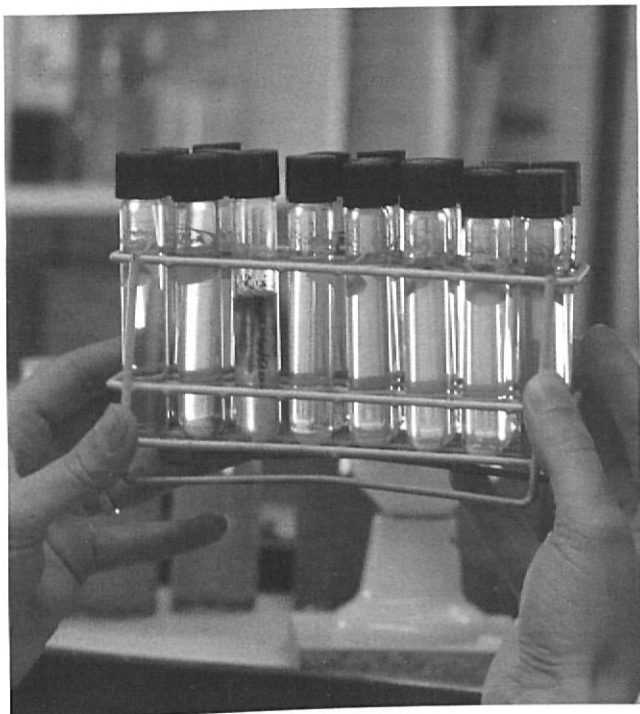
Un altre camp molt actiu en la química del nou segle és el de l'alimentació. Una branca en què treballem és l'avaluació de la presència de compostos relacionats amb els defectes sensorials

en vi i suro: ocasionalment es troben en vins embotellats unes olors desagradables de florit o d'humitat, de la qual en són responsables diferents famílies de compostos, tots ells volàtils. La presència d'aquests compostos en vins té diferents causes, i una són els taps suro que s'utilitzen per tapar les ampolles. Des de fa anys, investigadors del nostre departament col·laboren amb l'Associació d'Empresaris Surers de Catalunya per tal d'aprofundir més en aquest problema que els afecta directament. Es tracta, d'una banda, de posar a punt mètodes analítics basats en la cromatografia de gasos, per determinar en suro i en vi els cloroanisoles i clorofenols, els quals estan relacionats amb aquest defecte sensorial. D'altra banda també s'han realitzat estudis de migració del 2, 4, 6-tricloroanisole del tap al vi i alguns assaigs sobre l'eliminació d'aquest compost.

El suro també s'estudia a Girona des d'un altre vessant igualment innovador, ja que s'ha desenvolupat una nova tecnologia basada en la modificació química de la seva superfície. Cal tenir en compte que el suro és un material macroporós que conté múltiples cavitats de tipus hexagonal, d'aquí la seva baixa densitat i gran superfície. La seva modificació química genera nous materials que contenen grups químics específics a la seva superfície i li permet actuar com un nou tipus de suport sòlid compatible amb el medi ambient. Els diversos materials obtinguts s'han mostrat efectius com a suports amb propietats àcid-base, com a agents segrestants de metalls i com a agents segrestants d'electròfils.

Muntatge relacionat amb el desenvolupament de sensors químics.





També s'hi han immobilitzat enzims (lipases, proteases, etc.) i s'han mostrat actius tant en processos degradatius com en processos de síntesi. Aquests nous suports sòlids representen una nova línia de materials i biocatalitzadors suportats compatibles amb el medi ambient. D'aquesta forma, es multipliquen les utilitats del suro, i s'aconsegueix que aquest material esdevingui un suport per a un gran ventall de compostos químics. Depenent de la combinació, el suro es podria fer servir com a filtre per a piscines, com a imant, o per a material elèctric. Substituir en un futur les resines, que són materials sintètics, per suro, material natural i renovable, és un fita dels nostres investigadors. Aquesta tècnica també té aplicacions a la indústria alimentària, per exemple com a suport dels enzims, que són les proteïnes que provoquen reaccions a les cèl·lules.

Treballar en aspectes biològics implica dissenyar i trobar compostos que permetin accelerar reaccions i generar el mínim de productes de rebuig. Cal notar que la natura és una científica i una química ben enginyosa; precisament explicar els processos de la vida en termes químics segueix sent un dels principals reptes de futur. Relacionat amb els processos biològics i amb els enzims, la catàlisi és la disciplina que es dedica a buscar nous camins de reacció per tal d'augmentar la seva velocitat. Precisament la química bioinorgànica, per altra banda, estudia totes aquelles reaccions que tenen lloc en els éssers vius en què estan implicats elements inorgànics, per exemple metalls com el ferro o el coure. En moltes ocasions els complexos d'aquests elements inorgànics fan les funcions de catalitzadors. Un excel·lent exemple de la recerca

en aquest camp és un complex de pal·ladi amb un lligand macrocíclic nitrogenat i triolefínic, que és un bon catalitzador recuperable i reutilitzable en reaccions de formació d'enllaços carboni-carboni. Potser la fita més significativa dels nostres químics inorgànics ha estat la síntesi d'una nova molècula de ruteni, un metall poc corrent. Anteriorment molts investigadors havien intentat modelitzar al laboratori, mitjançant el manganès, l'oxidació de l'aigua per donar lloc a oxigen molecular, que de forma natural té lloc a les plantes, però fins ara no havien tingut pas gaire èxit. Els nostres investigadors han sintetitzat als laboratoris de la UdG un compost molt prometedor que conté dos àtoms de ruteni, i que converteix aigua en oxigen a una velocitat molt més alta que no pas la d'altres complexos de ruteni sintetitzats anteriorment. Aquest complex dimetàl·lic constitueix un dels pocs exemples de substàncies capaces d'oxidar l'aigua a oxigen, tal i com ho fan les plantes verdes en el seu fotosistema, i és un bon exemple de contribució al desenvolupament de fonts d'energia renovables.

ENTRE LA QUÍMICA I LA BIOLOGIA

Els químics gironins també estudien d'altres punts importants de la frontera entre la química i la biologia. Estem progressant en l'estudi teòric d'interaccions febles de tipus pont d'hidrogen o forces de Van der Waals, que són claus per entendre el funcionament de les biomolècules: les interaccions entre les diferents bases de l'ADN que donen lloc a la seva estructura helicoidal són precisament interaccions febles del tipus pont d'hidrogen. Ja que determi-





nades molècules cancerígenes provoquen el seus efectes impeditant les interaccions entre les bases de l'ADN, el coneixement d'aquest tipus d'interaccions és de vital importància per entendre com afecten aquestes molècules a l'ADN i pensar mecanismes per evitar els seus efectes.

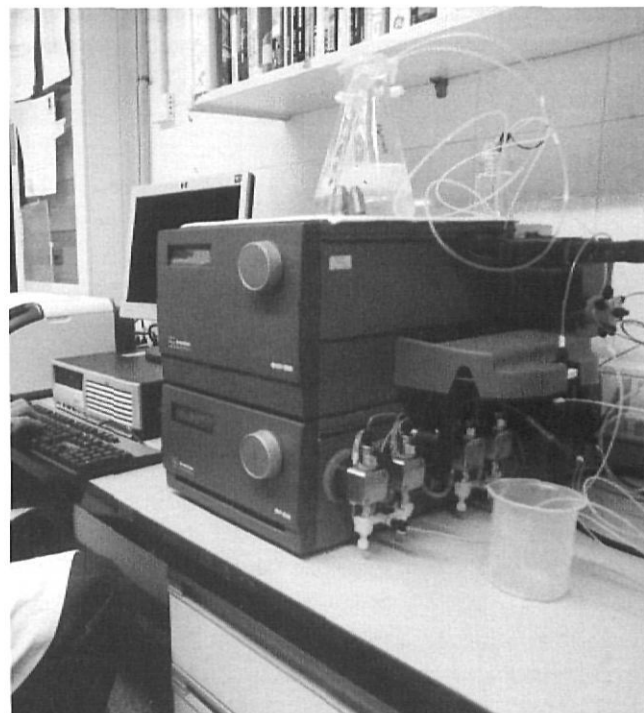
Aquesta relació entre la química i la medicina augmenta cada dia, i és un altre horitzó que ens porta el segle XXI. La col·laboració entre aquestes dues branques de la ciència ha de comportar no tan sols poder dissenyar millors fàrmacs que curin les malalties, sinó també preveure-les i diagnosticar-les. Més encara, la química treballa cada dia més al cantó de les noves disciplines de la proteòmica i la genòmica, que resulten del coneixement químic de les molècules de la vida: les proteïnes i l'ADN. Relacionat amb això, un altre gran camp d'interès futur és el disseny de nous fàrmacs. Actualment, el desenvolupament de nous compostos terapèutics constitueix una de les principals àrees d'investigació de les indústries farmacèutiques. Els mètodes teòrics, com la semblança molecular, tenen un paper molt important en el disseny de nous fàrmacs amb activitat biològica. En els darrers anys al departament s'ha investigat l'aplicació de les mesures de semblança molecular quàntica per determinar relacions tridimensionals entre l'estructura i l'activitat de determinats conjunts de molècules. Els fàrmacs que s'estudien són molècules molt grans, cosa que fa necessari desenvolupar mètodes aproximats. A més a més, per obtenir unes bones prediccions cal estudiar conjunts amb gran nombre de molècules i alhora que siguin representatives en un

ampli rang de la propietat analitzada. Aquests aspectes es tradueixen en un elevat cost computacional. Una forma d'accelerar el procés de càlcul consisteix en la paral·lelització dels programes, és a dir, en la utilització simultània de molts d'ordinadors, així com l'optimització dels algorismes que hi prenen part. Aquesta línia és molt activa entre els químics teòrics.

LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

En la indústria farmacèutica, la creixent necessitat de sintetitzar i identificar nous agents terapèutics de la manera més ràpida possible ha conduït al desenvolupament de noves tecnologies. D'entre aquestes, la química combinatòria ha esdevingut una eina clau en el procés de descoberta de nous fàrmacs, ja que permet la preparació simultània i ràpida d'un elevat nombre de compostos diferents (quimiotèques). Investigadors del Departament estan especialitzant-se en la preparació de quimiotèques de pèptids i compostos heterocíclics mitjançant una tecnologia anomenada Multipin, poc desenvolupada al nostre entorn, i que consisteix en la preparació de col·leccions de compostos orgànics ancorats sobre un suport sòlid de polietilè o polipropilè. Es tracta d'una tècnica eficaç i ràpida per a la preparació de quimiotèques, així com per a l'optimització eficient de reaccions químiques.

Els nostres químics també fan estudis menys aplicats i més relacionats amb la part més íntima de la química: entendre i si pot ser predir el mecanisme de les reaccions químiques elementals.





Normalment una reacció no es produeix al laboratori per una simple col·lisió de les dues molècules, sinó que té lloc a través d'un seguit de passos. El coneixement dels passos o etapes de la reacció és fonamental per poder incidir a continuació sobre la reacció de cara a millorar l'eficiència i selectivitat dels processos químics i fer-los més sostenibles per al medi ambient. Aquest coneixement no es pot assolir únicament mitjançant tècniques experimentals (etapes de reacció excessivament ràpides, per exemple) i per això calen simulacions teòriques per poder-los determinar. És com voler millorar un procés de producció d'un cotxe: si no es coneix cadascun dels passos de la cadena de producció difícilment es pot millorar el procés de fabricació.

Algunes prediccions assenyalen que d'aquí a 25 anys la majoria d'estudis d'estructura i reactivitat molecular de reaccions senzilles seran substituïts per simulacions amb ordinador. De fet, això es pot fer avui, però la potència dels ordinadors no permet encara resultats prou acurats o estudiar processos complicats. L'aliança entre la química combinatòria i els mètodes computacionals portarà a tenir una biblioteca de catalitzadors dissenyats per a fins específics. A diferència del que passa avui, se sintetitzaran compostos sota demanda. En aquesta nova disciplina de la química computacional, que aviat precedirà la química experimental, sense substituir-la, els nostres companys duen a terme tota mena de desenvolupaments de noves metodologies mecanoquàntiques que requereixen un fort aparell matemàtic, per exemple la caracterització basada en densitats electròniques de complexos de liti. Els

resultats de les simulacions, que són veritables experiments amb ordinador, s'han d'interpretar utilitzant les eines adequades, igual que els resultats dels experiments clàssics al laboratori. Un repte de futur que els nostres investigadors persegueixen és perfeccionar la informació que es pot extreure dels càlculs teòrics i millorar els canals de comunicació entre els químics teòrics i els experimentals.

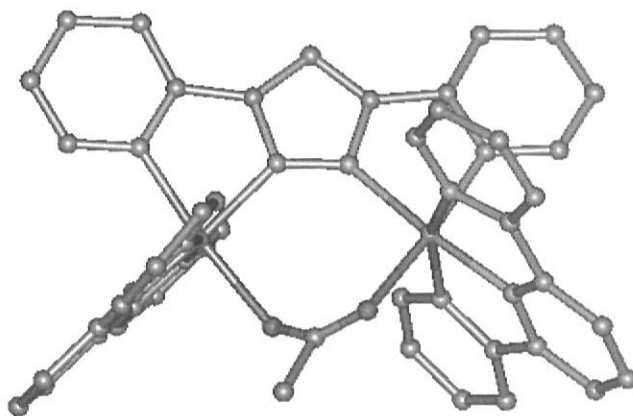
CONCLUSIÓ

Hem volgut assenyalar només alguns dels principals trets de la recerca que es duu a terme per part dels investigadors del Departament de Química. Cal dir que bona part d'aquesta recerca es fa en col·laboració amb d'altres investigadors de tot el món, bé perquè els gironins se'n van, perquè gent de fora ens visita, o senzillament perquè la recerca comporta fer experiments i comunicar de seguida el resultat mitjançant Internet.

La química a Catalunya té bona salut: és el segon sector industrial –darrere del fabricant d'automoció–, hi ha una bona demanda de químics i genera un gran valor afegit. Malauradament, en general a Europa, lloc de naixement de la química, la seva visibilitat social és molt reduïda i cal un fort esforç divulgador.

La indústria química està moltes vegades al servei d'altres indústries; de fet potser és una indústria d'indústries. No hi hauria cotxes sense química, ni electrònica, ni telèfons mòbils, ni TV via satèl·lit, ni avions, ni materials compostos, ni materials biocompatibles, ni medicaments. D'entre tres tipus de societats, les creadores, les manufacturadores i les consumidores, les més avançades són les primeres. Com hem vist en les línies de recerca que es desenvolupen, la Universitat de Girona, en particular a través del seu Departament de Química, potencia una recerca que intenta ajudar perquè la nostra sigui una societat avançada i sostenible.

Miquel Duran és director del Departament de Química de la UdG.



Complex de Ru, capaç d'oxidar l'aigua a oxigen.