

- 11 J. Elguero  
«Procesos químicos y reacciones en condiciones extremas o no clásicas», en *Política Científica*, CICYT, 1991, 28, 37-39.

### **Procesos químicos y reacciones en condiciones extremas o no clásicas**

*A través de los procesos químicos en condiciones extremas o no convencionales se obtienen nuevos compuestos y mejores propiedades –eléctricas, magnéticas, ópticas – y procesos más selectivos – ahorro de energía, disminución de contaminantes –. Hoy existen muchas formas de alcanzar las condiciones no clásicas: desde la química a altas presiones para la producción de metales sintéticos o la química a altas temperaturas, pasando por la sonoquímica o la química de la materia condensada.*

JOSÉ ELGUERO\*

En nuestro entorno natural existen condiciones (presión, temperatura, composición de la atmósfera) que sólo son una pequeña faceta de las condiciones de reacción posibles para una transformación química. Por razones prácticas, los procesos industriales suelen operar bastante cerca de dichas condiciones medioambientales. Las distintas condiciones dan lugar a caminos de reacción totalmente diferentes, por lo que hay que esperar nuevos e interesantes resultados usando condiciones o medios no convencionales. Así se podrán obtener compuestos nuevos y mejores con propiedades eléctricas, magnéticas, ópticas, mecánicas o químicas especiales, así como sustancias de alto valor añadido, tales como fármacos. En tecnología de las comunicaciones, en electrónica, hasta en tratamiento de residuos, se pueden encontrar procesos más selectivos, más ahorradores de energía y menos contaminantes.

Como se describe más adelante, existen muchas maneras de alcanzar tales "condiciones no clásicas": para explotar ese potencial y encontrar los mejores métodos en cada caso es necesario que los diferentes grupos se unan e intercambien sus experiencias, por lo que este campo está perfectamente adaptado a los programas europeos que hacen hincapié en los aspectos de complementariedad y colaboración multinacional.

#### **Química a altas presiones**

Es bien conocida la importancia que el empleo de altas presiones tiene, tanto con fines prácticos como para comprender la reactividad. La química moderna de altas presiones cubre varias disciplinas (química orgánica e inorgánica, bioquímica, química macromolecular, geoquímica) y solapa parcialmente con la física de altas presiones en lo que se refiere a transiciones electrónicas.

Ejemplos, importantes de esta química son la producción de nuevos materiales, polímeros, metales sintéticos ("sinmetales"), semiconductores y compuestos en estados de oxidación no habituales: la simulación de reacciones geoquímicas en el laboratorio; las reacciones en disolventes supercríticos y el desarrollo y adaptación de instrumentación para estudios de reactividad a altas presiones (RMN, por ejemplo).

#### **Química a altas temperaturas**

La química del estado sólido a altas temperaturas está íntimamente relacionada con la búsqueda de nuevos materiales con propiedades eléctricas, magnéticas, ópticas o mecánicas no convencionales. Caben citarse, entre otras, la síntesis de compuestos metaestables; la síntesis de compuestos con estados de valencia no usuales; la modificación de la superficie de materiales

cerámicos y de sus propiedades de conductividad y luminiscencia; la prevención de la formación de maclas y el estudio de fenómenos interfaciales en sistemas fluidos a altas temperaturas.

Todas las reacciones de átomos o radicales a altas temperaturas o, en general, altas energías son de gran interés: combustión, plasmas, estelares y láseres. Dado que las técnicas experimentales para estudiar tales reacciones son muy sofisticadas y onerosas, no es posible que un laboratorio las posea todas, por lo cual la cooperación es aquí imprescindible.

### **Sonoquímica**

Las aplicaciones de los ultrasonidos en química se pueden agrupar en cinco tipos, que van desde las reacciones en las burbujas de cavitación (en las microburbujas la compresión adiabática genera temperaturas de millares de grados y presiones de hasta 100 bar durante períodos muy cortos de tiempo) a las reacciones en la capa limítrofe caliente, donde se alcanzan temperaturas por encima de la temperatura crítica del disolvente, pasando por la aceleración de las reacciones líquido-sólido y líquido-líquido y su análisis teórico, las reacciones de radicales generados por ultrasonidos y la degradación de macromoléculas o de estructuras biológicas debido a la implosión de las burbujas de cavitación.

Dada la relación de algunos de estos procesos con los que se estudian en la química a altas presiones y a altas temperaturas, debe favorecerse la colaboración entre científicos que trabajan en los diferentes campos.

### **Microondas**

La aplicación de los efectos de calefacción de las microondas es un método reciente para acelerar la velocidad de las reacciones químicas, tanto en disolución como en estado sólido. Muchos disolventes orgánicos polares interactúan fuertemente con las microondas, proveyendo la base para numerosas aplicaciones en química orgánica e inorgánica.

Citaremos como ejemplos la síntesis de nuevos compuestos organometálicos y la intercalación de moléculas huésped en óxidos inorgánicos que actúan como hospedadores.

El acoplamiento de las microondas y de ciertos materiales sólidos es capaz de producir extraordinarios efectos de calentamiento por pérdida dieléctrica, lo cual puede ser utilizado para la síntesis de óxidos y sulfuros metálicos mixtos y para la síntesis de óxidos cerámicos superconductores a altas temperaturas.

Los tiempos de reacción en dichas síntesis se pueden acortar por un factor de  $10^2$ - $10^3$  sin que se produzcan radicales, como ocurre en la química de microondas en fase vapor.

### **Plasmoquímica**

Dentro de la "plasmoquímica" hay que distinguir la fría y la caliente, según se trate de plasma de alta o baja presión, respectivamente. En el segundo caso, las temperaturas son del orden de 3.000–5.000 K y sus aplicaciones cerámicas y para el tratamiento de residuos tóxicos pueden considerarse como pertenecientes al apartado de la química de altas temperaturas.

Las reacciones en un plasma frío son procesos que transcurren en condiciones de no equilibrio. Entre sus posibles aplicaciones destacan la síntesis de nuevos compuestos en fase gaseosa, la eliminación de contaminantes en gases, el tratamiento de superficies y la purificación de materiales mediante procesos de transporte.

Aquí también es necesaria una mejor comprensión de los procesos fundamentales si se quiere progresar en este campo.

### **Campos electromagnéticos**

Los resultados de numerosos trabajos indican que los campos eléctricos y magnéticos influyen en las reacciones químicas. La disponibilidad de campos extraordinariamente intensos, alta coherencia y duración muy corta, producidos por láseres, abre nuevas puertas al análisis químico, pero también a la generación de estados excitados bien definidos de moléculas con un comportamiento químico específico. La aplicación de láseres en química es un campo joven, habiendo aparecido gran número de resultados durante los últimos años. Entre las posibles aplicaciones figuran las siguientes: generación de reacciones selectivas en fase gaseosa, líquida y en superficies sólidas, incluyendo la formación de estructuras especiales en las superficies; dirección de procesos electroquímicos hacia electrodos especiales mediante láseres pulsados; procesos fotoquímicos en medio opaco; reparación y procesamiento de aerosoles y superficies y fotoquímica a escala microscópica.

Especial atención merece el estudio de la influencia de los campos magnéticos sobre los procesos químicos y bioquímicos.

### **Condiciones de microgravedad**

En general, las reacciones químicas en medios homogéneos no están influidas por la gravedad. Esto cambia en sistemas heterogéneos, en los cuales la transferencia de calor, de masa, y la convección están íntimamente ligados al proceso químico. Aquí la influencia de la gravedad puede jugar un papel importante, como puede verse en fenómenos tan diferentes como un incendio forestal o como en experimentos alrededor de estados críticos. El mayor interés en microgravedad (o en *súpergravedad*) vendrá, pues, de la química física y de la ingeniería química. Algunas de las líneas posibles son el crecimiento de cristales y metalurgia, el estudio detallado de flujos (efecto Merangoni), la influencia de las transiciones de fase y de las reacciones químicas sobre transporte de masa, movimiento y energía (no oscurecidos por convección natural).

Experimentos de este tipo están apoyados en Europa por los programas de microgravedad, tanto nacionales, como a través de la Agencia Espacial Europea.

### **Entorno micro-estructural**

Dentro de los sistemas restringidos hay que señalar el entorno micro-estructural, que representa otro medio no habitual donde pueden tener lugar procesos muy selectivos y eficaces. El ejemplo más conocido es el de las zeolitas; sin embargo, su potencial para nuevas síntesis o para la heterogeneización de catalizadores homogéneos no está exhausto. Hay mucho interés en zeolitas con poros muy anchos, en nuevos métodos de caracterización de centros activos y en modelos SAR (relaciones estructura-actividad). Materiales inorgánicos microporosos, tales como arcillas apiladas, deben ser incluidos en el programa.

El desarrollo de compuestos orgánicos similares está en sus comienzos. Tienen el inconveniente de su menor resistencia térmica y química, pero permiten programar el tamaño, forma e incluso quiralidad de poros. También es posible funcionalizar sus paredes internas.

No hay que olvidar que existen micro-estructuras en fluidos, por ejemplo en surfactantes o en copolímeros de bloque. Es posible fotopolimerizar, extraer el disolvente y dejar un material de alta porosidad.

### **Química atmosférica**

De los procesos en el entorno es necesario destacar el campo de la química atmosférica, que estudia la química y la fotoquímica de gases en el estado de trazas y la dinámica de la atmósfera terrestre. Esto se aplica tanto a la composición natural de la atmósfera como a los cambios producidos por las trazas de gases no naturales debidos a la actividad humana. Se ha detectado que ciertos gases juegan un papel esencial en el control de los intercambios de radiaciones en la atmósfera y, en consecuencia, en las condiciones climáticas en la Tierra.

Por lo tanto, estudios relacionados con lo anteriormente dicho son condición necesaria para la comprensión de los cambios en los ecosistemas, para entender los fenómenos de contaminación atmosférica y para predecir con realismo el clima terrestre.

## **Cosmoquímica**

Gracias a sus espectros de absorción se descubrió, hace cincuenta años, que en el universo, además de átomos y de iones elementales, había radicales relativamente complejos tales como  $CH$ ,  $CH\cdot$  y  $CN$ . Actualmente han sido observados más de sesenta, entre ellos compuestos aromáticos. Todos han sido observados en grandes nubes interestelares que se encuentran a unos pocos kelvin.

La competencia de la química interestelar, en lo que a sus aspectos químicos se refiere, está en fase de desarrollo. Un mejor conocimiento cuantitativo de la formación y destrucción de las especies químicas, moléculas y radicales, presentes en el espacio, podría arrojar luz sobre la evolución.

## **Los procesos químicos en condiciones extremas**

La presencia española en este campo es escasa. Esta es una razón más para que jóvenes grupos elijan algunas de las fascinantes vías que se han mencionado, tales como los estudios de RMN a muy altas presiones, muy altas temperaturas como disolvente (aquatermolisis), microondas en química organometálica, influencia de los campos magnéticos en procesos bioquímicos, experimentos en microgravedad (en colaboración con el INTA), zeolitas "orgánicas" etc. Hay que incentivar, con los medios de que dispone la Dirección General de Investigación Científica y Técnica, a los jóvenes investigadores para adentrarse en estos campos. Ellos obtendrán satisfacción y el país conocimientos en una zona de la química de máxima relevancia industrial.

Afortunadamente no hay que partir de cero. A título de ejemplo citaremos una pequeña lista de actividades ya existentes: en sonoquímica se trabaja en Madrid (Universidad Complutense y Consejo Superior de Investigaciones Científicas) y en Alcalá de Henares; las microondas se usan en síntesis orgánica en Alcalá de Henares; hay excelentes grupos trabajando en geoquímica y en efectos biológicos de campos magnéticos en Barcelona (CSIC) y Madrid (Hospital Ramón y Cajal); el estudio de zeolitas está a muy alto nivel tanto en Madrid (Consejo Superior de Investigaciones Científicas) como en Valencia (Universidad Politécnica); finalmente, en cosmoquímica, hay que recordar el trabajo pionero del profesor R. Carbó (Gerona).

Esta lista, muy incompleta, hecha de memoria, muestra ya nuestra potencialidad. España debe apoyar este sub-proyecto para que sus investigadores coordinen esfuerzos con sus colegas europeos y alcancen así, en corto tiempo, un nivel comparable a ellos. El sector industrial español debería darse cuenta de que este tema es de enorme relevancia para su competitividad.

\* Instituto de Química Médica del Consejo Superior de Investigaciones Científicas.