

Química y Tecnologías Químicas

José Luis García Fierro

Arbor CLXVI, 653 (Mayo 2000), 141-153 pp.

En esta contribución se hace una sencilla revisión de la química que se realiza en los Institutos del CSIC con la finalidad de obtener una idea general de su estado y de las posibilidades de evolución en un futuro cercano. Para una mejor comprensión de la situación actual, se hace imprescindible un acercamiento a la historia y a la génesis de los Institutos. El estudio comprende, en primer lugar, un examen de la dimensión del potencial de la química, para hacer después un recorrido por cada uno de los Institutos y revisar las actividades de actualidad. Finalmente, se concluye con unas previsiones de futuro y se incide en algunas temáticas que se presentan como especialmente atractivas, dentro del esquema de los programas nacionales y de la UE y de las necesidades o deficiencias del sistema productivo.

1. Antecedentes

Tenemos que remontarnos a los años 30 para situar el primer núcleo de química en el CSIC. Es en esa fecha cuando la Junta de Ampliación de Estudios reúne a sus investigadores en el Instituto de Física y Química, que comienza su andadura en el edificio Rockefeller. Aún siendo un Instituto nuevo, en solo una década todos los químicos ya se habían integrado en el Instituto Alonso Barba. Posteriormente, a finales de los años 50 muchos de estos grupos se incorporaron al Patronato de Investigación Científica y Técnica «Juan de la Cierva», que surge como organismo autónomo dentro del CSIC y tiene vigencia hasta finales de los años 70. Los químicos con vocación más químico-física,

como los electroquímicos, radioquímicos, termoquímicos y espectroscopistas constituyeron el Instituto de Química-Física «Rocasolano», mientras que los más centrados en la síntesis orgánica se agruparon en el Centro Nacional de Química Orgánica en un nuevo edificio. Desde su primera andadura en 1966 este Instituto tuvo una progresión rápida. Los Departamentos que integraban este Instituto, Química Orgánica General, Plásticos y Caucho, Fermentaciones Industriales y Lipoquímica, se transformaron en Institutos en 1968. Finalmente, el Departamento de Química Médica del Instituto de Química Orgánica se segregó como nuevo Instituto en 1973. El Instituto de Química-Física «Rocasolano» experimentó una evolución muy similar. Este Instituto generó el Instituto de Estructura de la Materia y en 1975 el de Catálisis y Petroleoquímica. Aún antes de la ubicación en un nuevo edificio en el Campus de la Universidad Autónoma de Madrid en 1991, un grupo de investigadores de este último Instituto se trasladó a la Universidad Politécnica de Valencia, donde crearon el Instituto de Tecnología Química como centro Mixto CSIC-Universidad Politécnica.

La investigación sobre química del CSIC en otras provincias tuvo una génesis mucho más lenta. Estuvo asociada durante muchos años a Laboratorios y Departamentos universitarios, ya que no disponía de edificios propios y, además, contaba con un número de científicos muy reducido. El caso más representativo es el de Barcelona, hasta que en 1968 el Centro de Investigación y Desarrollo empezó su andadura, con la creación del Instituto de Química Orgánica y el de Tecnología Química y Textil. El Instituto de Química Orgánica, después de cambiar a denominarse Instituto de Química Orgánica Aplicada, dio lugar en 1979 al Instituto de Química Bioorgánica. Estos dos Institutos quedaron en 1986 adscritos administrativamente al Centro de Investigación y Desarrollo, al igual que lo hizo en 1993 el Instituto de Tecnología Química y Textil. Todos estos cambios de denominación y de adscripción fueron acompañados de cambios de personal, lo que dificultó aún más las re-estructuraciones. Finalmente, en 1998 se segregaron el Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona «Pascual Vila», y de Investigaciones Biológicas de Barcelona, ambos adscritos al Centro de Investigación y Desarrollo.

El punto de partida de la química del CSIC en Sevilla se sitúa en los años 40 cuando se creó la Sección de Química Orgánica adscrita al Instituto de Química «Alonso Barba». En la Facultad de Química de la Universidad de Sevilla se creó en 1970, un centro coordinado del CSIC con una sección de Química Inorgánica adscrita al Instituto de Química-Física «Rocasolano», otra de Silicatos al Instituto al Patronato Juan de la Cierva y otra de Física al Instituto de Óptica

«Daza de Valdés». Pero el verdadero germen del actual Instituto de Investigaciones Químicas de Sevilla surge al comienzo de los años 90 en Instituto de Química Orgánica General de Madrid en el que se aglutinan científicos de este Instituto con otros del Instituto de Química Biorgánica de la La Laguna y del Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, hasta que comenzó su rodadura como Instituto en 1996. En Santiago de Compostela se creó también una Sección de Alcaloides del CSIC, asociada al Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Santiago.

En Canarias las primeras relaciones de la química con el CSIC se remontan a 1965 cuando el Instituto de Investigaciones Químicas de Tenerife, fundación del Cabildo, se constituyó como Centro Coordinado del Patronato Juan de la Cierva. Una década después se creó el Instituto de Productos Naturales Orgánicos, un centro propio del CSIC con una vinculación muy directa con el Cabildo. Posteriormente, este Instituto se fusionó con otro centro propio del CSIC, el Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología de Canarias, en el actual Instituto de Productos Naturales y Agrobiología de Canarias. A este Instituto se le incorporó más recientemente un reducido número de científicos de la Estación Vulcanológica de Canarias.

Los actuales Institutos de Carboquímica de Zaragoza y el Instituto Nacional del Carbón de Oviedo tienen su punto de partida en el Instituto del Combustible, fundado en 1940. Este Instituto, ubicado originalmente en Madrid, se traslada a Zaragoza en 1942. Muy poco después se produjo una re-estructuración de los centros de investigación sobre carbón, con la creación subsiguiente del Instituto Nacional del Combustible. En 1965 este Instituto se transforma en el Instituto Nacional del Carbón y sus Derivados, con una sede central en Oviedo y otros dos Departamentos de Investigación en León y Zaragoza. Una década después este Instituto se desdobra en el Instituto Nacional del Carbón de Oviedo y del Instituto de Carboquímica de Zaragoza.

2. Dimensión del área de investigaciones químicas en el CSIC

La actividad y las peculiaridades que concurren en cada uno de los Institutos de Química son muy variadas. La comparación de los Institutos en términos de competencias y de tareas muestra una gran heterogeneidad en la orientación de la actividad científica. Aún con esta peculiaridad, pueden agruparse en dos bloques diferenciados: Institutos con vocación más tecnológica (INCAR, ICB, ICP, ITQ, LITEC), y los restantes Institutos más focalizados en ramas fundamentales de

la Química (IQF, IQM, IQO, IIQMB, IIQ, IPNA, e ICMA-QUI). Quedan incluidos en estos doce Institutos unos 250 científicos de plantilla, junto a un grupo importante de doctores cualificados y experimentados, con contrato de reincorporación vigente o agotado y curricula densos. Se debe añadir, además, un número relativamente elevado de becarios pre-doctorales y un colectivo moderado de personal de apoyo. La capacidad de captar recursos es muy diferente, y está directamente relacionada con el tipo de investigación que realizan. Esta capacidad es sustancialmente mayor en los Institutos más tecnológicos debido a que sus tareas están más cercanas al sector productivo. Se debe reseñar también el hecho de que el nivel de las contribuciones científicas a revistas especializadas, es sustancialmente mayor en los Institutos más tecnológicos debido a que sus tareas están más cercanas al sector productivo, aunque el nivel de las contribuciones sigue, en general, una tendencia opuesta. Estos parámetros sencillos, deducidos de un análisis tan simple, resultan de enorme interés para incidir sobre las líneas maestras de los Institutos para alcanzar el equilibrio que siempre se desea.

Lista de siglas de los Institutos de Química

Instituto de Química Física «Rocasolano», Madrid (IQF); Instituto de Química Orgánica General, Madrid (IQO); Instituto de Química Médica, Madrid (IQM); Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, Madrid (ICP); Instituto Nacional del Carbón, Oviedo (INCAR); Instituto de Carboquímica, Zaragoza (ICB); Laboratorio de Investigación de Tecnologías de la Combustión, Zaragoza (LITEC) (centro mixto CSIC-UNIZAR-DGA); Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, Zaragoza (ICMA-QUI) (centro mixto CSIC-UNIZAR en el que solo se contempla la parte química); Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona (IIQAB); Instituto de Tecnología Química, Valencia (ITQ) (centro mixto CSIC-UNIVA); Instituto de Investigaciones Químicas, Sevilla (IIQ) (centro mixto CSIC-UNISE); Instituto de Productos Naturales y Agrobiología, Tenerife (IPNA).

3. Actividades Científicas

3.1. Instituto de Carboquímica

La producción y transformación de vectores energéticos y la reducción de la contaminación que generan en el proceso de liberación de energía

constituyen la línea medular de actuación del Instituto de Carboquímica. Todas estas actividades son esencialmente tecnológicas y llevan asociada una componente ingenieril importante. En la línea de producción de energía se investigan procesos avanzados de combustión tales como la gasificación en lecho fluidizado, la autocombustión, la gasificación subterránea y la pirólisis y carbonización a baja temperatura. El tratamiento y limpieza de los gases resultantes de la combustión de los vectores energéticos es otra de las líneas robustas que desarrolla con intensidad y a buen nivel. La incorporación de adsorbentes regenerables para la limpieza de gases en caliente, la preparación de carbones activos para la eliminación de dióxido de azufre y de óxidos de nitrógeno, la incorporación de adsorbentes para eliminar el ácido sulfídrico en los procesos de gasificación integrada en ciclo combinado (GICC) y la reducción de emisiones de hidrocarburos poliaromáticos (HPAs) son los ejemplos más representativos de la actuación en la limpieza de los gases postcombustión. La transformación de residuos, con un potencial energético notable, se estudia en varias direcciones que van desde el hidropesado de residuos de petróleo, gomas y carbón hasta el reciclado de aceites industriales usados de matriz carbonosa, se contempla y se desarrolla a buen nivel. Se debe hacer mención también a la modelización de los procesos y a las metodologías analíticas e instrumentación desarrollados de forma colateral, que han fortalecido la investigación realizada. Otra línea de importancia tecnológica es la fabricación de nanotubos de carbono, la preparación de electrodos y adsorbentes de matriz de carbono. Con alguna excepción justificada, todas las actividades se desarrollan a buen nivel y con un potencial de investigadores jóvenes importante. Con estos ingredientes, el futuro de este Instituto tecnológico parece asegurado.

3.2. Instituto de Química-Física «Rocasolano»

Es el centro de investigación en Química con más tradición. Ya desde el comienzo orientó sus actividades hacia la química experimental. A lo largo de varias décadas se ha ido equipando de infraestructuras y experiencias que permiten la modificación, desarrollo e implantación de técnicas físicas aplicables al estudio de la Química estructural y de la reactividad. Estas técnicas se aplican desde sistemas atómicos o moleculares sencillos hasta sistemas macromoleculares de considerable complejidad. La configuración, por tanto, como centro pluridisciplinar con una componente mayoritaria de experimentalistas se ve complementada, particularmente en los últimos años, con la faceta teórica

y la disponibilidad de una buena capacidad de cálculo. Las propiedades térmicas, termodinámicas, reactividad y estabilidad de especies químicas representa una de estas direcciones. Otras líneas importantes se centran en el estudio de las propiedades fotoquímicas y espectroscópicas, incluyendo parámetros fotofísicos dependientes del tiempo en la escala del picosegundo, en la tecnología laser para aplicaciones en química selectiva, en las propiedades electroquímicas de la interfase sólido-líquido y corrosión de materiales metálicos, en las estructurales de materiales cristalinos y de proteínas, así como en la estructura electrónica de sólidos.

3.3. Instituto de Investigaciones Químicas

Como se esquematizó arriba, se trata de un Instituto de reciente creación. Las actividades que se desarrollan quedan focalizadas en química biológica, química organometálica y catálisis, y química de carbohidratos. Básicamente, la química biológica de los productos naturales desarrollada se centra en la determinación estructural de compuestos de origen marino, la síntesis completa siguiendo una aproximación de tipo biogenético, y finalmente el diseño molecular de miméticos o antagonistas de productos naturales. Las actividades más relevantes se sitúan en el entendimiento del modo de acción de poliéteres de origen marino que actúan sobre fosfatasa y canales de sodio. El aislamiento, en una primera fase, del ácido ocadoico del alga *Prorocentrum lima*, un inhibidor potente de la defosforilación de proteínas, particularmente de residuos serina/treonina, continua con la síntesis conformacional restringida de análogos de este ácido que permite entender el proceso de unión de la proteína. La síntesis total de poliéteres fusionados en posición *trans*, compuestos de origen marino potentes activadores de canales de sodio, se ha abordado con éxito, con el objetivo específico de identificar la estructura central biológicamente activa. La selección de este tipo de moléculas ha resultado de gran utilidad, no sólo por su arquitectura novedosa sino también por su acción biológica específica. La química organometálica se desarrolla con intensidad en varias direcciones. La preparación y reactividad de complejos de tipo carbeno de naturaleza electrófila se implementa con el análisis mecanístico y cinético de las reacciones de inserción del fragmento carbénico en enlaces metal-hidrógeno y metal-carbono. La línea de reactividad química de compuestos organometálicos se dirige también a la activación de diferentes tipos de enlaces en sustratos orgánicos, al estudio de las propiedades catalíticas en reacciones tan variadas como hidroge-

nación, hidroformilación y polimerización de olefinas. La dirección de polimerización de olefinas ligeras es novedosa y con una perspectiva química y tecnológica importante, en la que el análisis del mecanismo de la ciclometalación y la reactividad de alquilos de naturaleza electrófila respecto a la ruptura de enlaces carbono-carbono, desempeñan un papel esencial. Las áreas de actividad en la química de carbohidratos incluyen estudios específicos de señalización intracelular, factor de crecimiento y reconocimiento molecular. El objetivo de la señalización intracelular es el conocimiento de las bases moleculares de un receptor que actúa en la transducción de la señal intracelular que opera en el caso de la insulina y en un número de hormonas y factores de crecimiento. Las interacciones específicas entre carbohidratos y sus receptores se han investigado en detalle usando sistemas modelo. La dirección de la investigación actual en este campo se orienta hacia las interacciones carbohidrato-carbohidrato que están implicadas en los mecanismos moleculares de adhesión celular. Específicamente, las actividades se focalizan en la exploración de los requerimientos estructurales de los oligosacáridos que intervienen en el reconocimiento molecular de la esponja *Microciona prolifera* in vivo por medio de interacciones carbohidrato-carbohidrato específicas, al mismo tiempo que mostrar si estas estructuras son los epítomos en el autoreconocimiento celular de estas esponjas.

3.4. *Laboratorio de Investigación de Tecnologías de Combustión*

La actividad científica que desarrolla el LITEC gira en torno a la combustión, la tecnología mediambiental y la mecánica de fluidos, en su doble faceta experimental y computacional. En la vertiente experimental cuenta con instalaciones y equipamientos para realizar diagnósticos experimentales en flujos con y sin reacción química. En particular, ha puesto en funcionamiento un combustor semi-industrial multi-combustible equipado con técnicas de muestreo y análisis de gases, partículas en llama, así como perfiles longitudinales y radiales de temperatura. La puesta en práctica del concepto de escala semi-industrial ha permitido avanzar en la línea de medición in situ y en la simulación de flujos industriales. La componente más fundamental se ha cuidado de forma equilibrada. Se han desarrollado técnicas avanzadas de diagnóstico óptico y se han aplicado a flujos industriales inertes y reactivos. La investigación de los procesos fluido-dinámicos y de combustión mediante la simulación por ordenador de flujos fluidos y reacciones químicas es otro de los puntos sobre el que gravita una buena parte de

la actividad científica del LITEC. La simulación de flujos, de formación de contaminantes en motores de combustión interna, de dispersión de contaminantes en la atmósfera y de flujo con reacción química resumen la actividad computacional en su faceta más aplicada. En cambio, los modelos avanzados de turbulencia y combustión, los métodos de dinámica de vorticidad y la simulación numérica directa representan algunas direcciones de la investigación más fundamental.

3.5. *Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón*

Una parte de la investigación química realizada en el ICMA se centra en el estudio de la química organometálica de un buen número de metales de transición. Con la experiencia adquirida, los diferentes grupos de investigación realizan aportaciones de primera fila en los aspectos sintéticos, estructurales o teóricos extensibles a otras áreas de la química. La faceta práctica se contempla también con la catálisis asimétrica y con complejos de metales transición. La síntesis de catalizadores organometálicos activos y selectivos en procesos de hidrogenación, transferencia de hidrógeno, Diels-Alder o ciclopropanación, es una práctica continua. Los avances progresivos en síntesis orgánica asimétrica permiten la utilización de sustratos quirales de compuestos naturales de coste bajo para preparar compuestos nitrogenados similares a nucleósidos, péptidos y aza-azúcares u oligonucleótidos con potencial actividad antiviral. En todas estas actividades se conjugan las experiencias cruzadas de expertos con el soporte experimental de técnicas potentes de estudio de los compuestos organometálicos y sistemas catalíticos.

3.6. *Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona*

La actividad científica es variada e intensa en torno a las áreas de química ambiental, orgánica-biológica, ecotecnologías, péptidos y proteínas, y tecnología de tensoactivos. La investigación en química ambiental se basa en el origen, transporte y evolución de las aportaciones orgánicas naturales y antropogénicas en el medio ambiente, tanto en la atmósfera como en la columna de agua de los sedimentos y el efecto subsiguiente sobre organismos marinos y, en parte, sobre la salud humana. La química orgánica-biológica se orienta hacia diferentes aspectos de la síntesis orgánica, química bio-orgánica y de materiales bio-orgánicos, que comprenden desde insecticidas biorracionales hasta química

teórica y computacional. En el área de ecotecnología se analizan dioxinas y furanos en emisiones gaseosas, en tejidos orgánicos y alimentos, en el tratamiento de aguas residuales y en el desarrollo de metodologías de fabricación menos lesivas para el medio ambiente. En el área de péptidos y proteínas las actividades se focalizan en la síntesis de péptidos como agentes terapéuticos, principios activos e inmunógenos, en la administración y direccionamiento de fármacos convencionales y en la conformación de secuencias peptídicas con modelos de membrana. La actividad en el área de tensioactivos ha evolucionado desde la investigación básica en sistemas convencionales hasta la más aplicada, utilizando moléculas complejas y modelos de estudio de biocompatibilidad.

3.7. *Instituto Nacional del Carbón*

Las actividades principales giran en torno a materiales de matriz de carbono, carboquímica y carbonización, y materiales cerámicos. La investigación de los materiales con estructura de carbono se orienta hacia la síntesis de nuevos materiales como fullerenos, nanotubos y fibras, al estudio de la textura y la química de la superficie y de las metodologías de modificación. El área de carboquímica y carbonización se ha adaptado a las necesidades del sector productivo. Se realizan estudios básicos y aplicados de los procesos de conversión del carbón y derivados en productos de valor elevado como fibras y microesferas. El reciclado de residuos procedentes de plantas de coquización y siderúrgicas, la reducción simultánea de la contaminación provocada por óxidos de nitrógeno y de hidrocarburos poliaromáticos generados en los procesos de transformación del carbón constituyen otro bloque importante de actividad. Además, se estudian los contaminantes orgánicos originados por el uso del carbón y la geoquímica orgánica de la materia sedimentaria. Las actividades en el área de materiales cerámicos comprenden la síntesis de materiales cerámicos puros, materiales refractarios para la industria del acero, el procesado y medida de propiedades termomecánicas de materiales refractarios y cerámicas avanzadas.

3.8. *Instituto de Catálisis y Petroleoquímica*

El Instituto, con una vocación tecnológica decidida, se ha focalizado en una investigación orientada hacia procesos de interés para el sector productivo, al mismo tiempo que ha mantenido un buen equilibrio con la componente más fundamental de este tipo de investigación. La

catálisis sigue desempeñando un papel esencial en temáticas tan importantes como química medioambiental, producción de combustibles limpios y transformación de vectores energéticos. Los esfuerzos en cada una de estas direcciones de investigación van dirigidos hacia el control de la selectividad de las reacciones catalíticas implicadas en los procesos. La reducción de las emisiones de gases contaminantes a la atmósfera, de sustancias orgánicas y metales pesados en aguas, la producción de hidrógeno y conversión del gas natural mediante nuevas tecnologías, la eliminación de heteroátomos de fracciones de petróleo y procesos que transcurren en condiciones extremas de operación, representan algunos ejemplos ilustrativos de estas actividades. Otra dirección de la investigación se focaliza en el control de reacciones de compuestos orgánicos en cavidades de sistemas mesoporosos, zeolitas y geles. Ello ha permitido la síntesis de moléculas orgánicas, de naturaleza compleja, de forma eficiente y selectiva en medios tanto acuosos como orgánicos. La química de superficies, en su vertiente teórica y experimental, y la incorporación de metodologías analíticas nuevas para obtener información sobre los mecanismos moleculares de activación, han venido a reforzar e implementar los estudios catalíticos. Merece una mención especial la puesta en marcha de instrumentación adecuada y precisa de seguimiento del avance de las reacciones en condiciones in situ. Todo ello ha incrementando el interés del sector productivo que queda plasmado en acuerdos de cooperación y de cesión de tecnología, principalmente en las áreas de energía, industria farmacéutica y refino del petróleo.

3.9. *Instituto de Tecnología Química*

Desde su puesta en marcha, este Instituto ha mantenido una orientación eminentemente tecnológica. Sus actividades giran en torno a las tecnologías catalíticas y su aplicación a procesos de petroquímica, química fina y refino del petróleo. Todas ellas comprenden la génesis de los sistemas catalíticos, la aplicación en reacciones de interés para la industria y la investigación a escala atómica o molecular de la estructura de los catalizadores y de la implicación de ésta en la reactividad. La experiencia es muy amplia en la preparación y modificación de sistemas zeolíticos y materiales mesoporosos con estructura y textura muy bien definidas. La componente ingenieril subyace en todos estos estudios. La desactivación de los catalizadores durante su operación y el diseño de los reactores en los que se realizan los procesos mencionados representan las líneas maestras de la actividad ingenieril.

Otras facetas, aunque cultivadas con menor intensidad, son la dinámica molecular y la ecología química.

3.10. *Instituto de Productos Naturales y Agrobiología*

Las actividades más importantes giran en torno a la síntesis de compuestos orgánicos, tanto de productos orgánicos y biorgánicos como de productos naturales. El análisis conformacional de las distintas estructuras y de los mecanismos de reacción implicados en la síntesis es una constante en cada una de las investigaciones realizadas. La puesta a punto y el desarrollo de una nueva metodología de trabajo, basada en radicales orgánicos como agentes reactivos quirales, ha resultado de gran utilidad en numerosas hemisíntesis y reacciones en las que intervienen estructuras cíclicas o condensadas. La identificación y aislamiento de moléculas orgánicas complejas presentes en líquenes, hongos, algas y microorganismos marinos constituyen otra de las actividades notables del Instituto. Todas estas actividades son eminentemente básicas pero se cultivan a un nivel elevado.

3.11. *Instituto de Química Médica*

Desde la creación del Instituto, la investigación se focalizó en el diseño, caracterización estructural y evaluación de la acción sobre procesos víricos, infecciosos, tumorales y degenerativos que tienen lugar en los seres vivos. La labor experimental se complementa con la aplicación de la dinámica molecular a la generación de estructuras y a la determinación de la configuración más estable de tales estructuras. La química combinatoria ha resultado de gran utilidad, y como complemento de las metodologías clásicas de diseño de heterociclos y otras estructuras orgánicas que integran los esqueletos de moléculas complejas que integran los fármacos. Algunas actividades se realizan en conexión directa con la industria farmacéutica, con la que mantiene una cooperación estrecha. Aunque la experiencia individual queda diferenciada, en este tipo de investigación se observa homogeneidad en la experimentación y en los estudios teóricos importante.

3.12. *Instituto de Química Orgánica General*

La química se desarrolla en las áreas de productos naturales, síntesis orgánica, química orgánica biológica y química ambiental. En el área de productos naturales se determina la estructura de metabolitos se-

cundarios así como la hemisíntesis de productos naturales de interés biológico. La síntesis de compuestos enantioméricamente puros por incorporación de estructuras quirales, y la síntesis de estereo- y regio-selectiva de oligosacáridos, se realizan de forma simultánea. En síntesis orgánica se estudian nuevos materiales fotosensibles adecuados para elementos ópticos holográficos, colorantes y biomoléculas como sondas de emisiones laser, síntesis asimétrica dirigida y complejos organometálicos anclados en sustratos inorgánicos. La actividad en química orgánica biológica gira en torno a la síntesis y estructura de oligosacáridos y otras moléculas de interés biológico y sus interacciones con biomoléculas. En química ambiental la actividad comprende el desarrollo de instrumentación y de metodologías específicas. Se preparan columnas capilares para cromatografía y electroforesis capilar y se ponen en práctica metodologías analíticas de determinación de organoclorados, metales, dioxinas y furanos en alimentos, suelos y seres vivos.

4. Previsiones de Futuro

Un examen de las contribuciones químicas SCI revela que el CSIC aporta aproximadamente un 20% del total de publicaciones de la comunidad química española. En el CSIC existe una cierta fortaleza en la faceta fundamental, incluyendo la síntesis—orgánica, organometálica e inorgánica—, el análisis estructural de compuestos, la teoría y el modelado molecular, pero en el área tecnológica, su posición es aún mejor. El área más representativa de esta faceta tecnológica que alcanzó un desarrollo más rápido es, sin duda, la catálisis. Las razones principales de este progreso son principalmente dos: (i), la presión progresiva de las legislaciones ambientales sobre las emisiones gaseosas contaminantes procedentes de la combustión de combustibles fósiles, y (ii), las crisis internacionales continuadas en el sector energético, y más específicamente en el mercado del petróleo.

En la última mitad de los años 90 estamos asistiendo a un cambio espectacular en el concepto y significado de la química convencional. Existe un consenso entre los químicos sobre la necesidad de disponer de procesos menos lesivos para el ambiente, mayor eficiencia en las transformaciones químicas y mínimo consumo energético. Estas peculiaridades, agrupadas bajo la denominación genérica de «química verde», van a ser el distintivo esencial de los procesos químicos de las próximas décadas. El parámetro clave que define las características mencionadas de la química del siglo 21 es la selectividad de los procesos químicos.

El desarrollo de estos procesos nuevos debe empezar desde la escala de laboratorio, con la utilización de materias primas alternativas, condiciones de operación, sistemas catalíticos y automatización del proceso. Todos estos factores deben contribuir a hacer procesos más eficientes y seguros. Esta orientación resultará esencial para adaptar la nueva química a las necesidades del mercado y, sobre todo, a mantener el equilibrio deseado entre las fuentes de materias primas y la conservación del ambiente.

La instrumentación analítica a escala suficientemente pequeña, la química experimental de alta resolución en escalas de tiempos típicos de las vibraciones atómicas, la química de los procesos implicados en las pilas de combustible y la síntesis asimétrica de compuestos orgánicos asistida por la catálisis representan algunas de las áreas que requieren mayor desarrollo. Se debe mencionar también el área de expansión creciente de la química hacia la interfase de la biología. La síntesis de moléculas orgánicas complejas, la instrumentación avanzada de identificación y caracterización de moléculas en estructuras supramoleculares tridimensionales deben contribuir a esclarecer los procesos de réplica en los seres vivos. Análogamente, el progreso en metodologías analíticas de alta resolución que permitan identificar trazas de contaminantes en alimentos, en seres vivos y en el ambiente, se perfila como otra de las contribuciones y direcciones importantes de la Química.

La nanoquímica, o química a escala esencialmente atómico-molecular es otra de las líneas maestras de actuación. El conocimiento de las superficies sólidas y su ingeniería es el resultado, no sólo del desarrollo de instrumentos analíticos sofisticados que permiten la descripción real de la disposición e interacción entre entidades atómicas y moleculares en las superficies sólidas, sino también de las herramientas teóricas, de la mano de la química cuántica, que resultan cruciales para interpretar de forma cuantitativa la magnitud de las interacciones y también particularizar los procesos elementales implicados en esas interacciones. El uso combinado de estos instrumentos permitirá la fabricación de sistemas coloidales catalizadores, nanotubos y otras nanoestructuras a medida, con propiedades predeterminadas para una aplicación específica.