

Algunos retos de la química en el siglo XXI

Ronald Breslow y Andoni Garritz

El cambio de siglo y de milenio ha dado mucho de qué hablar sobre el futuro de las ciencias. Recogemos aquí varios de los retos mencionados en la literatura para la química durante el presente siglo. A Andoni Garritz lo ha inspirado en esta tarea una conferencia de Ronald Breslow (2002) y un libro del mismo autor (1997), a quien está sumamente agradecido por haberle proporcionado los acetatos de su conferencia y por haber aceptado ser coautor de esta editorial.

También hemos podido reunir las opiniones emitidas sobre el particular por tres grandes científicos británicos: Peter Atkins (2000), Norman Greenwood (2000) y David Rice (2000). Igualmente, hemos abrevado de otros trabajos estadounidenses sobre el tema, como los de Baum (1999) y Gwynne (2001), al igual que de los de la sección "New Voices in Chemistry", publicada con motivo del 125 aniversario de la American Chemical Society (ACS, 2001), y los de la revista *Scientific American* (2001) sobre nanotecnología.

Hemos logrado adicionalmente recuperar la opinión al respecto de cuatro grandes científicos mexicanos: por una parte, nuestro muy recordado Jacobo Gómez Lara (1998), y por la otra, a Eusebio Juaristi (1999) y a Norah Barba y Rosalinda Contreras (2000). Igualmente, hemos recogido la opinión vertida por la renombrada fisicoquímica argentina Lydia Cascarini (1999) en esta misma revista. Agradezco igualmente a Jorge Vázquez y Eduardo Bárzana por haberme facilitado sus consideraciones sobre los retos de la bioquímica y de la biocatálisis.

Hemos agrupado los retos de acuerdo con su naturaleza, aunque muchos de ellos tienen variados impactos y debieran por ello ubicarse en dos o más apartados.

Retos de la bioquímica

Necesitamos aprender por qué las enzimas son tan efectivas, de tal manera que podamos diseñar catalizadores biomiméticos artificiales que funcionen tan bien como las mejores enzimas.

Requerimos hacer sistemas químicos organizados que imiten el funcionamiento de las células biológicas o que se desempeñen como máquinas diminutas. (La química se está moviendo de ser reduccionista, volviéndose integracionista). Una de las áreas que más impulso han tenido hasta ahora es la que se refiere a la genómica y sus derivaciones. Los genomas de humano, de microorganismos que afectan al humano, de plantas de importancia agrícola, y otros, han sido secuenciados o se encuentran en proceso de secuenciación. El haber secuenciado todo el genoma humano

abrió grandes perspectivas sobre la posibilidad de conocer los genes que intervienen en los procesos de desarrollo normal y patológicos.

Es hora de empezar a aplicar el conocimiento del genoma humano, para resolver problemas de enfermedades genéticas mediante la reparación del gene específico que las causa y, con la ayuda de la química combinatoria, el diseño de todo un cuerno de la abundancia de nuevos fármacos hechos a la medida de pacientes individuales y de sus enfermedades.

El estudio de la expresión génica, sea como el transcriptoma (mensajes derivados de los genes y que se expresan en un estado o condición fisiológica dados) o como el proteoma (proteínas que se sintetizan en un estado o condición fisiológica dados) cobrarán cada vez más impulso en los siguientes años. Una nueva variante, la metabolómica, se concentrará en estudiar los tipos de reacciones metabólicas y productos sintetizados y acumulados en un estado o condición fisiológica dados. Sólo así se podrá tener una verdadera integración entre genoma y funcionamiento celular.

En la ciencia que subyace bajo estos objetivos prácticos requerimos entender completamente la química de la vida, incluyendo la química del cerebro y de la memoria. Con estos elementos podremos caminar hacia la creación de computadoras biónicas, que incorporen la forma en que funcionan las neuronas, la solución, pues, al problema de la inteligencia artificial.

Otra área que habrá de tener gran impulso es la biotransformación por la vía de la ingeniería genética, y que se enriquecerá con el avance de la genómica y sus variantes. Casi todos los aspectos de la vida en el futuro podrían depender de una utilización racional, inteligente y con sentido biológico de esta área de la ciencia, incluyendo las ciencias de los alimentos y de la ecología, la biomedicina o la agricultura. Mientras que el potencial para explotar tecnológicamente los conocimientos genéticos existe, y sería relativamente fácil implementarlos a gran escala, los conocimientos y discusión sobre las repercusiones biológicas, ecológicas, sociales y éticas de su uso masivo son todavía marginales. El gran reto para este siglo es el descubrir cómo usar estas herramientas científicas para el provecho de la humanidad en su conjunto, sin destruir el equilibrio biológico de nuestro planeta, o polarizar aún más a la ya de por sí desequilibrada sociedad mundial.

Retos de la química medicinal

La química medicinal es una de nuestras ramas más exitosas, mediante la cual hemos producido los antibióticos y otros medicamentos que han llevado la esperanza de vida de 47 años en 1900 a por encima de los 75 años hoy. Sin embargo, todavía necesitamos agentes antivirales efectivos y nuevos antibióticos para enfrentar a las bacterias resistentes. La malaria y la amibiasis siguen constituyendo una verdadera calamidad.

Necesitamos medicamentos para curar el cáncer, prevenir los derrames cerebrales, atacar las enfermedades del corazón, el mal de Alzheimer, la hipertensión arterial, la osteoporosis, la obesidad, los defectos genéticos, la esquizofrenia, la diabetes, la artritis y otros problemas, tan importantes como el síndrome de inmunodeficiencia adquirida.

Los métodos para el desarrollo de fármacos habrán de ser cada vez más racionales, empleando el modelaje molecular para el diseño específico de ligantes a partir de la estructura precisa del sitio activo.

Requerimos mejores maneras de dispensar los medicamentos a sus blancos, incluyendo dispositivos como un páncreas artificial que pueda detectar niveles de glucosa y añadir la cantidad necesaria de insulina.

Necesitamos materiales biocompatibles para reemplazos de órganos, así como para huesos y dientes artificiales. Dicha biocompatibilidad tendrá que ver con el reconocimiento molecular específico de los órganos, para que no sean rechazados por el organismo.

Retos de la alimentación

Precisamos de productos químicos para la alimentación que preserven y mejoren nuestras dietas con seguridad incuestionable.

Necesitamos el desarrollo de variantes genéticas de plantas que presenten resistencia a las plagas, a la escasez de agua y de nutrientes. No hay duda de que la ingeniería genética jugará un papel mayor en la alimentación de la población mundial en este siglo, aunque su adopción se enfrenta a otros retos en el camino, debido al miedo público (sobre todo en Europa) a la manipulación genética. Los organismos genéticamente modificados se encuentran en un periodo crítico actualmente, del cual habremos de salir por medio de la investigación acuciosa de sus posibles impactos.

Requerimos el desarrollo de productos agroquímicos que mejoren aún más el rendimiento de los cultivos.

Por ejemplo, un gran acierto para este siglo significaría la síntesis de un compuesto capaz de llevar a cabo la fijación del nitrógeno atmosférico a condiciones ambientales, de la misma forma que la realiza la enzima nitrogenasa en

los nódulos de la raíz de las leguminosas. Sería como una forma de proveer al reino vegetal de un fertilizante eficiente que, manejado apropiadamente, aumentaría los rendimientos de las cosechas de alimentos sin agotamiento ni contaminación de los suelos.

Retos en materiales

Requerimos materiales estructurales mejorados, probablemente compósitos basados en resinas o en cerámicas, que sean estables a altas temperaturas y fácilmente maquinados. (La química es una ciencia excitante y creativa, y parece que no existe fin para sintetizar nuevos tipos de compuestos, enlaces y características estructurales novedosas, que los químicos podrán sin duda desarrollar.)

Necesitamos materiales con propiedades eléctricas y ópticas útiles, incluyendo superconductores de alta temperatura. Precisamos protección superficial que sea de verdad duradera y resistente (una pintura que dure 100 años.)

Necesitamos entender la química de moléculas grandes, incluyendo biopolímeros, tan bien como comprendemos la química de pequeñas moléculas.

Requerimos reaprovechar muchos de los materiales que solemos enviar a la basura, mediante su reciclado.

Nos esperan nuevos resultados en el área de la nanotecnología. Debemos estar preparados para desarrollar nuevos métodos analíticos para preparar y manipular estructuras de dimensiones moleculares, tendiendo hacia la fabricación de computadoras de tamaño molecular, monitores realmente pequeños, dispositivos fotónicos y electrónicos, nanorresistores y nanocables, así como materiales de verdad resistentes a partir de nanotubos de carbono, entre otras cuestiones.

Retos ambientales

Las manufacturas y productos químicos deben ser ambiental y biológicamente benéficos, nunca perjudiciales. Debemos aprender cómo hacer productos, incluidos los refrigerantes, que sean estables a lo largo de su vida, pero que se degraden de manera que no persistan en el ambiente o en los seres vivos.

Precisamos desarrollar catalizadores selectivos, que nos permitan manufacturar productos útiles, incluyendo polímeros, sin producir basura no deseada y sin emplear energía excesiva.

Requerimos insecticidas que no perjudiquen a objetivos que no sea nuestra intención afectar, de ninguna manera. Necesitamos aprender cómo concentrar y manejar las basuras radiactivas de las plantas de energía nuclear.

Precisamos no cejar en el esfuerzo de reconstituir la capa de ozono en la estratosfera.

Requerimos ponernos de acuerdo para atacar el problema del calentamiento global del planeta, dependiendo menos de la energía proveniente de los combustibles fósiles. El problema del suministro de agua potable a las grandes ciudades es muy grave y se irá poniendo cada día peor. Requerimos dejar de contaminar el agua líquida, así como aprender a descontaminarla en grandes cantidades, y encontrar formas rentables de desalinizar el agua de mar.

Retos en energía

Es previsible que durante este siglo la fusión nuclear controlada se convierta en una realidad y que compita y supere a la alternativa de la fisión nuclear. Otra alternativa promisoría la constituye el abaratamiento de la energía eólica y de la fotovoltaica.

Necesitamos diseñar baterías baratas que hagan verdaderamente prácticos los vehículos eléctricos, baterías que sean fácilmente recargables y con alta energía por unidad de peso.

Requerimos una manera de almacenar y transportar hidrógeno con seguridad, de tal forma que pueda ser utilizado en la celda de combustible de un automóvil, produciéndose vapor de agua como producto de la reacción. La economía de hidrógeno depende de la idea de que podamos generar hidrógeno en un lugar apropiado, tal como una planta nuclear, y entonces transportarlo como un combustible.

Retos sociales

Los problemas de hambrunas y de mala alimentación serán más controlables cuando detengamos el crecimiento de la población; en este punto la química habrá de contribuir con la producción de anticonceptivos femeninos y masculinos más eficientes y seguros.

Vivir hasta la edad de 120 años no será inusual en este siglo y tendremos que repensar cómo la vida humana se organiza con cada vez más adultos mayores, cada vez más viejos. En 1998 había 66 millones de personas con 80 o más años, una de cada 100 personas. Ese número se multiplicará por seis hacia el año 2050, cuando alcanzará 370 millones de gentes, una de cada 24 personas tendrá 80 o más años. Hacia 2050, imás de 2.2 millones de personas tendrán 100 o más años!

Otro reto que habrá que encarar es dar igualdad de oportunidades en química a las mujeres frente a los hombres.

Las necesidades de salud, educación, habitación, vestido y sustento, transporte y recreación decorosos para una población todavía creciente, seguirá planteando la necesidad de producir mejores alimentos, medicamentos, materiales, telas, automóviles, etcétera.

Retos contra el terrorismo

Requerimos aprender cómo detectar explosivos en contenedores cerrados, tales como minas o equipaje.

Precisamos aprender a detectar y desintoxicar los agentes de guerra química y las armas bioterroristas.

Retos en cómputo

Necesitamos desarrollar transistores a escala molecular, para encoger las computadoras a la nanoescala.

Necesitamos desarrollar métodos computacionales que de manera realista predigan las propiedades de compuestos desconocidos, incluyendo los mecanismos por los cuales participarán en reacciones. Hacia esta área se orientarán los cursos de fisicoquímica del futuro, hacia el modelado y la dinámica molecular, así como hacia la visualización de propiedades.

Requerimos métodos de computadora para predecir la estructura tridimensional de una proteína a partir de su secuencia de aminoácidos, de tal forma que la información que da la secuencia del genoma humano pueda ser traducida a las estructuras proteicas que están codificadas. Igualmente, pronto estaremos calculando interacciones en tiempo real entre grandes moléculas tridimensionales. Pronto evolucionarán nuevos enfoques teóricos que nos ayudarán a comprender mejor el enlace químico y las reacciones, y nos llevarán a probar estas nuevas teorías sobre sistemas químicos reales.

Retos de síntesis

Precisamos desarrollar métodos sintéticos que nos permitan hacer todas las moléculas importantes con rendimientos razonables y empleando esquemas sintéticos compactos y poca energía, de tal manera que ningún compuesto útil sea inaccesible para su síntesis práctica. (La química es una ciencia creativa, donde la síntesis de nuevos materiales es una actividad central.)

Es de esperarse que en un futuro cercano se habrán desarrollado ya métodos prácticos para la preparación de cualquier tipo de compuestos quirales. (Esto requerirá habilidades mecánicas, ingeniería creativa y un profundo conocimiento del tema.)

Requerimos perfeccionar las herramientas para estudiar mecanismos de reacción, de tal manera que observemos directamente el proceso y podamos diseñar catalizadores basados en nuestro conocimiento.

Necesitamos mejorar nuestras herramientas para determinar estructuras, de forma que no represente un reto la síntesis de pequeñas cantidades de materiales no cristalinos.

Esperamos pronto sintetizar moléculas que se autorepliquen y reacciones químicas que se autocorrijan.

Requerimos un mejor entendimiento de las reacciones que tienen lugar sobre intercaras y sobre superficies, en particular las reacciones catalíticas.

Retos de la biocatálisis

La biocatálisis tendrá una importancia creciente en el área de la síntesis orgánica, desplazando procedimientos conocidos o generando nuevas vías para productos conocidos o aun para nuevos productos. Pensemos en los mercados típicos de anticancerígenos o los tratamientos preventivos para enfermedades genéricas como la hepatitis o la influenza.

El mercado de productos farmacéuticos es de tales magnitudes que da cabida a procesos más caros pero que redunden en mayores purzas y altos excesos enantioméricos, aspectos en los que la biocatálisis presenta sus mejores ventajas en relación a la catálisis inorgánica.

Aunque parezca contradictorio, las nuevas habilidades de manipulación genética que permiten la producción de biocatalizadores más estables y baratos que la generación anterior deberán llevar a desarrollar y consolidar las aplicaciones biocatalíticas en productos masivos, inclusive en procesos de un solo ciclo. Como ejemplos podemos citar a la industria papelera, la producción de químicos básicos como acrilatos, el tratamiento de aguas residuales industriales, o inclusive en aplicaciones petroleras. Esto último deberá llevar a las denominadas biorefinerías para mediados del siglo XXI.

Retos de la química supramolecular

Se espera que pronto aprendamos sobre las fuerzas de interacción intermolecular no covalentes, responsables del reconocimiento molecular, así como de los cambios conformacionales que resultan de la asociación.

Entre las líneas de investigación de mayor interés están el desarrollo de dispositivos moleculares capaces de efectuar tareas como la transferencia de información, cooperatividad de funciones, catálisis y autoreproducción.

Retos de la química interestelar

Requerimos extender nuestra visión química de cómo la vida pudo surgir espontáneamente sobre la Tierra o en cualquier parte.

Necesitamos entender la química que ocurre en el espacio interplanetario e interestelar, donde la espectroscopía es nuestra herramienta principal.

Éstos son algunos, pero sólo algunos, de los retos que la química va a encarar durante este siglo. Nuestro campo ha sido sorprendente en su capacidad de resolver problemas no

más sencillos que éstos. Sin embargo, hay una predicción más acerca del progreso que puede hacerse con absoluta certidumbre: los químicos saldrán con invenciones y descubrimientos que no están abarcados en una lista de objetivos como ésta, y diremos: ¿Por qué nunca pensamos en eso?

Tenemos acceso a un gran número de estudiantes en nuestros cursos de química: ¡Hagámoslos embajadores entusiastas de la química!

Referencias

- ACS, "New Voices in Chemistry: Young Chemist Look at the Future", pages 51-291, *Chemical & Engineering News*, March 26, 2001.
- Atkins, P., "Comment 2000. Reflections and hopes from leading chemists", *Education in Chemistry*, **37**(2), 39, 2000.
- Barba, N. y Contreras, R., "La química en México", en *Las ciencias exactas en México*, Arturo Menchaca, coordinador, p. 144-177, Fondo de Cultura Económica, México, 2000.
- Baum, R. M., "Putting The New Millenium in Perspective", *Chemical & Engineering News*, p. 45-47, December 6, 1999. Following this paper there is a special report called *Millennial Musings*, with five papers related with the theme "Millennium Special Report: Chemistry in the Service of Humanity".
- Breslow, R., *Chemistry Today and Tomorrow. The Central, Useful and Creative Science*, American Chemical Society, Washington, 1997.
- Breslow, R., "The Reputation of Chemistry", conferencia plenaria presentada en la 17th Biennial Conference on Chemical Education, Western Washington University, Bellingham, 27 de julio de 2002.
- Cascarini de Torre, L. E., "La química hacia los albores del siglo XXI", *Educ. quim.*, **10** (1), 25-29, 1999.
- Contreras, R., "En la química, todo está por hacerse: Dra. Contreras Theurel", conferencia informada en la *Gaceta de la Facultad de Química*, UNAM, México, p. 3-4, VI época, número 63, julio de 2002.
- Greenwood, N., "Comment 2000. Reflections and hopes from leading chemists", *Education in Chemistry*, **37**(5), 122, 2000.
- Gwynne, P., "25 Years of Hot Fields in Chemistry", *Chemistry*, anniversary issue, 2001.
- Juaristi, E., "Desarrollo y aplicación de la química en el siglo XXI", *Educ. quim.*, **10** (1), 8-12, 1999.
- Gómez Lara, J., "Los conceptos químicos en el umbral del siglo XXI", en *Ciencias de la Materia. Génesis y evolución de sus conceptos fundamentales*, Luis de la Peña, coordinador, p. 205-239, Siglo XXI Editores, México, 1998.
- Rice, D. "Comment 2000. Reflections and hopes from leading chemists", *Education in Chemistry*, **37**(6), 150, 2000.
- Scientific American*, "Nanotech. The Science of the Small Gets Down to Business", septiembre de 2001.