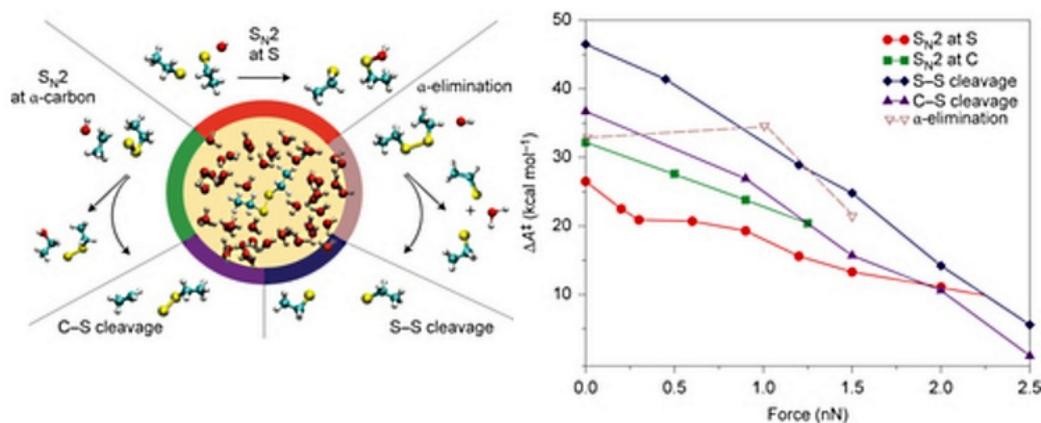


## Cómo producir cambios químicos a partir de fuerzas de tensión

Investigadores de la Universidad de Barcelona y de la Universidad Bochum del Ruhr (Alemania) han logrado explicar un caso de cambios químicos provocados por la aplicación de fuerzas de tensión: el de la ruptura de moléculas de disulfuros enlazadas a cadenas poliméricas. En el estudio se ha empleado la simulación por ordenador para describir las transformaciones que se producen cuando estas moléculas están sometidas a fuerzas mecánicas de diferente intensidad.

UB

13/12/2016 12:29 CEST



Esquema de diferentes reacciones analizadas durante el estudio. / Przemyslaw Dopieralski et al.

Hasta el momento, el calor, la luz y la electricidad han sido los instrumentos clave para realizar las reacciones químicas, cuyo resultado es la conversión de una molécula en otra. Sin embargo, hace unos años se demostró que sometiendo algunas moléculas a fuerzas mecánicas de estrés o tensión también se consiguen modificaciones químicas, no observables bajo otras condiciones. El campo que estudia las relaciones de la química de moléculas y compuestos con la fuerza mecánica a la que están sometidos es la mecanoquímica covalente, un ámbito de investigación floreciente.

Ahora un trabajo publicado en *Nature Chemistry* muestra una complejidad

inesperada en la reacción de reducción de los disulfuros en solución alcalina, que prevé la ruptura del enlace covalente entre los átomos de carbono y sulfuro cuando esta es activada por una fuerza mecánica externa.

---

Los resultados abren el camino para diseñar aplicaciones como la síntesis de materiales que al estresarse se vuelven más rígidos

Sus autores son los investigadores Jordi Ribas Ariño, del Departamento de Ciencias de los Materiales y Química Física de la Universidad de Barcelona (UB), y el equipo liderado por el profesor Dominik Marx en la Universidad Bochum del Ruhr (Alemania), quienes han podido explicar los cambios químicos provocados por la aplicación de fuerzas de tensión en el caso de la ruptura de moléculas de disulfuros enlazadas a cadenas poliméricas.

Para describir las transformaciones que se producen cuando estas moléculas están sometidas a fuerzas mecánicas de diferente intensidad, los investigadores han usado la simulación por ordenador.

Los disulfuros (moléculas formadas por el enlace covalente de dos átomos de azufre) presentan unas propiedades mecanoquímicas muy particulares, ya que cuando están sometidos a tensión mecánica experimentan cambios conformacionales que modifican por completo su reactividad. La descripción precisa de estos cambios fue publicada por los mismos autores del estudio actual en un artículo que apareció en Nature Chemistry en 2013.

"Los resultados abren el camino para diseñar aplicaciones concretas de estas pequeñas moléculas, como podrían ser la síntesis de materiales que al estresarse se vuelven más rígidos (por ejemplo, músculos y huesos) o bandas elásticas que al tirar se acortan o, por otro lado, la aplicación de ultrasonidos para activar reacciones químicas selectivas", apunta Jordi Ribas Ariño, que también es miembro de la Red de Referencia en Química Teórica y Computacional (XRQTC).

Asimismo, estos resultados permiten predecir las propiedades y el comportamiento de los llamados mecanóforos, moléculas que pueden

experimentar una reacción química cuando se ven sometidas a fuerzas mecánicas de tensión externas.

**Referencia bibliográfica:**

P. Dopieralski, J. Ribas-Ariño, P. Anjukandi, M. Krupicka, D. Marx. «Unexpected mechanochemical complexity in the mechanistic scenarios of disulfide bond reduction in alkaline solution». *Nature Chemistry*, octubre de 2016. Doi: 10.1038/nchem.2632

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

MATERIALES | TENSIÓN | REACCIONES QUÍMICAS |

**Creative Commons 4.0**

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)