

- 14 J. Elguero  
«La química y su entorno», en *Libros de España*, Biblioteca Nacional, Buenos Aires, 1995,  
9 al 29 de mayo 1995, pp. 110-114.

## 1. Parte general

Hay, casi con certeza, lo que podríamos llamar un nivel epistemológico óptimo para cada ciencia en un momento dado de su historia; tratar de forzarlo para darle un carácter más fundamental puede desviar esa ciencia de su trayectoria correcta. La ciencia de la química aún no está condicionada por los métodos físico-matemáticos como otras ciencias.

La filosofía de la química está basada en gran parte en los conceptos de similitud y analogía. En esto, la química difiere y está mucho más cerca de la biología y de la medicina. Ello hace de la química un terreno ideal para ensayar un análisis de datos basados en la similitud (los datos químicos provienen de experimentos bien controlados y están medidos con precisión) y si esos métodos dan buenos resultados, transferirlos luego con ciertas garantías a problemas más complicados como los que se encuentran en biología y medicina.

Kuhn definió los paradigmas como conjuntos coherentes de teorías compartidos por una comunidad de científicos pertenecientes a la misma disciplina. Bien que la química ha evolucionado mucho entre 1950 y 1990, ese progreso no se ha acompañado de una ruptura. Acontecimientos tan notables como el que supuso el descubrimiento de las reglas de Woodward-Hoffmann también pertenecen al paradigma dominante.

Uno se puede preguntar si estamos en la víspera de un nuevo paradigma y si hay signos anunciadores de su llegada. A los científicos no les gusta hacer predicciones negativas: basta con que digan que algo es imposible para que otro científico lo describa. La historia de la ciencia está llena de predicciones negativas erróneas.

Sin embargo, a la pregunta ¿está al llegar un nuevo paradigma en química? mi respuesta es no. La química, toda la química, está firmemente enraizada en la mecánica cuántica y entre las cuestiones abiertas de la física actual nadie pone en duda la química cuántica. Una revolución en química sólo puede llegar a través de una revolución en física, y nada hace pensar que eso vaya a ocurrir.

Durante mucho tiempo la química, como las otras ciencias naturales, trabajó para entender la naturaleza. Aún ese carácter natural lo conservan la física (las leyes físicas existen fuera de la física) y la biología (las leyes que rigen los organismos vivos existen independientemente de su estudio). Es verdad que con la ingeniería genética, los biólogos pretenden crear seres vivos nuevos (la genética clásica también creó seres no naturales, como perros pastores o vacas frisonas). Pero en química ya hace mucho tiempo que la elucidación de la estructura de los productos naturales ocupa un lugar secundario frente a la creación de objetos nuevos, artificiales, que nunca existieron antes de que los químicos los prepararan. Y que probablemente son objetos únicos en el universo, pues aunque existan otras civilizaciones galácticas o extragalácticas, es muy poco probable que hayan creado las mismas moléculas que nosotros.

Estamos viviendo una etapa de cambio, la transformación de la época de la construcción molecular en la época del diseño a priori de propiedades. La época de la construcción de bellos y complejos edificios moleculares está en su cénit, síntoma claro de que su declive está próximo. La síntesis del fullereno C será más ardua que la del dodecaedro, C<sub>20</sub>H<sub>20</sub>, pero los químicos saben que cualquier edificio molecular que respete ciertas leyes generales (cada vez menos restrictivas) puede ser construido.

La predicción cualitativa y cuantitativa de las propiedades físicas y biológicas de los compuestos químicos aún no sintetizadas - predicción a priori - sólo es posible de una manera imperfecta para algunas pocas propiedades. Generalmente se trata de una predicción relativa, es

decir, de predecir las propiedades de una molécula nueva con relación a una serie de moléculas de la misma familia (analogía) cuyas propiedades son conocidas.

El objetivo último de la química es describir la vida, incluidos los procesos mentales - el pensamiento -, afectivos - el amor - y lo que se considera más característico del ser humano - el sentido del humor – en términos exclusivamente químicos.

Eso no quiere decir que esos objetivos sean actualmente alcanzables. Como dice Sir Peter Medawar: "Ningún científico es admirado si fracasa al intentar resolver problemas que rebasan su capacidad; si acaso puede esperar el amable desprecio del político utópico. Si la política es el arte de lo posible, la investigación es, sin duda, el de lo soluble. Los buenos científicos estudian las cuestiones más importantes que creen poder resolver; a fin de cuentas, su cometido profesional es solventar problemas, no meramente esforzarse en hacerlo". Atacarse prematuramente a un problema científico es un error. El ejemplo del SIDA muestra como no basta inyectar sumas cuantiosas de dinero público para resolver un problema básico rápidamente. Hoy día no es aceptable un proyecto de investigación que trate de determinar los procesos moleculares que tienen lugar en el cerebro de una persona que se sonroja al recordar una situación embarazosa que le ocurrió hace veinte años, pero quizás sí un proyecto que se proponga describir una célula entera como una máquina química.

## 2. Parte española

En primer lugar aquí se entiende por química española la química realizada en España. Aunque nos alegramos de los logros de nuestros compañeros que investigan en Europa o en Estados Unidos, consideramos que los resultados que obtienen deben contabilizarse en el balance del país en que residen.

Los químicos, en tanto que químicos, no tienen patria. La razón es obvia: no hay química española. No la hay en general, como no hay ciencia española. Hay una historia de la ciencia que incluye la historia de la química. Pero un descubrimiento químico, una vez integrado en el corpus doctrinal, pierde su nacionalidad. Tampoco hay química española en el sentido más restrictivo de contribución significativa a la química en un período o un tema dado (como se puede hablar de la química suiza de productos naturales de los años veinte o de la química supramolecular francesa de nuestros días). España no ha sido ni es aún un gran país "químico" ni siquiera un país medio con una rama de la química dominante a nivel internacional.

¿Han sido y son los químicos españoles infravalorados internacionalmente? No es esa la impresión de quien esto escribe. Los químicos y, en general, los científicos españoles de gran valía, como D. Santiago Ramón y Cajal, han conseguido un reconocimiento universal y duradero. Pero es cierto que a nuestros científicos les ha sido más difícil alcanzar el reconocimiento internacional que a sus colegas alemanes, ingleses o estadounidenses.

¿Cuál es la razón? En primer lugar ha existido una falta de continuidad en el tiempo y una falta de masa crítica. Es bien sabido que, salvo trabajos muy excepcionales, el impacto de las publicaciones científicas es escaso si no alcanzan un volumen significativo y lo mantienen durante un período de tiempo prolongado. En segundo lugar, España ha vivido durante muchos años aislada de las corrientes de pensamiento, primero europeas y luego internacionales. Eso ya no es verdad y nuestros químicos compiten ahora en condiciones de igualdad con sus colegas de otros países desarrollados.

Yo, cuando alguna vez escribo al Profesor Lehn, lo que menos me impresiona es que sea Premio Nobel. Lo que me crea una cierta sensación de amargura son sus señas:

¡Universidad Louis Pasteur,  
Instituto Le Bel,  
calle Blaise Pascal!

Eso es lo que nunca podremos tener. Premios Nobel en química estoy seguro que sí (ya deben estar entre nosotros), pero un Pascal, un Le Bel, un Pasteur, eso no.

Tenemos un terrible desgarrón en nuestro pasado. Hemos tenido un imperio donde no se ponía el sol y no hemos usado ese poder extraordinario en beneficio de la ciencia. Hoy, dado nuestro tamaño, nuestra población, nuestra riqueza, ya no nos corresponde dar nacimiento a un Newton, a un Gauss, a un Lavoisier.

Sin ánimo de polemizar, antes al contrario, con el ánimo sereno, creo que el origen de nuestro dramático desfase con el resto de los países europeos está en un concepto equivocado de la relaciones del Estado con la iglesia. España ha sido martillo de herejes, pero ese martillo ha aplastado muchas vocaciones científicas. Hoy, cuando una profunda religiosidad es compatible con una excelente profesionalidad, tal hecho es difícil de entender.

Del pasado cercano (nuestros "padres") algunos nombres: en química orgánica Ignacio Ribas, José Pascual Vila, Manuel lora Tamayo y el recientemente fallecido Félix Serratos; en química inorgánica Enrique Gutiérrez Ríos; en química-física, espectroscopía y química teórica Enrique Moles y Miguel Catalán (un cráter en la luna lleva su nombre).

Del presente algunos nombres: en química orgánica José Castells (Universidad de Barcelona), José Barluenga (Instituto "Enrique Moles" de Oviedo) y Pedro Molina (Universidad de Murcia); en química inorgánica Miguel Ángel Alario (Universidad de Madrid) y Ernesto Carmona (Universidad de Sevilla); en química-física, espectroscopía y química teórica José Luis Abboud (CSIC, Madrid), Juan Bertrán (Universidad Autónoma de Barcelona), Javier Catalán (Universidad Autónoma de Madrid), Manuel Rico (CSIC, Madrid) y Manuel Yáñez (Universidad Autónoma de Madrid)

La química española, a juzgar por los indicadores más usuales (calidad y número de publicaciones recogidas en las bases de datos) se encuentra en un estado satisfactorio. La entrada masiva de jóvenes investigadores en las universidades, gracias a la ley de Reforma Universitaria, la reciente expansión del CSIC y las considerables sumas disponibles para becas y proyectos han hecho posible la notable progresión de la química española en la última década.

Sigue habiendo personas insatisfechas y eso es bueno. Lo que es más preocupante es que algunas de ellas al examinar la pirámide calidad (en el eje vertical)/cantidad (en los ejes horizontales) llegan a la conclusión de que hay que mantener y reforzar la punta pero suprimir la base. ¿Cómo es posible ignorar que los grandes científicos han logrado sus avances espectaculares gracias al trabajo paciente, cuidadoso de científicos modestos y hoy olvidados? Hay que ayudarles y mantener vivas sus líneas de trabajo. Todo químico envidia Oxford, Cambridge, el Politécnico de Zürich o Berkeley, todo país debe intentar tener centros de excelencia, pero sería una locura hacer  
Conclusión: en los próximos veinte o treinta años, los químicos van a invadir la biología que va a dejar una política científica dirigida exclusivamente a ellos.

### **3. La química y su entorno**

Puede parecer una opinión corporativa, pero es mi convencimiento profundo de que la física no va a invadir el dominio de la química pero que la química si va a invadir el de la biología. ¿Qué puede esperar la biología de la química? Todo. ¿Qué puede esperar la química de la biología? Casi nada: ideas para nuevos temas de investigación. Como la síntesis de la vitamina B12 lo fue para Woodward y Eschenmoser y la de la palitoxina para Kashi. Pero nada a nivel profundo, a nivel conceptual (qué más da que se descubra un reactivo nuevo o un mecanismo nuevo trabajando sobre una sustancia, aunque sea el ADN, importante en biología o sobre un producto totalmente exobiótico?). No hay nada en un sistema vivo que lo difiera (ni siquiera que lo caracterice) de una reacción química industrial. No es verdad, como se ha dicho, que los químicos postulamos modelos aditivos y los biólogos, modelos interactivos.

La relación de la biología con la química es la misma que la de la meteorología con la física: muy complicada pero sin misterio. Es más un problema de supercomputación que de ideas nuevas (ideas químicas nuevas, quiero decir). ¿Qué la biología está basada en las interacciones no covalentes y la química en las covalentes, como se oye decir? Pues evidentemente es falso, doblemente falso. Primero, las interacciones covalentes juegan un papel esencial en biología, lo que pasa es que los químicos las han estudiado bien y por eso se dan por obvias. Segundo, ¿qué químico

estructural no está interesado por las interacciones débiles? Los enlaces de hidrógeno, los efectos cooperativos, el stacking de bencenos, las fuerzas de dispersión, etc, están en el corazón de nuestras preocupaciones. Cada cosa a su tiempo: ya hemos establecido una sistemática de las fuerzas enlazantes, ahora (y en los próximos decenios) les llega el turno a las no enlazantes.

Conclusión: en los próximos veinte o treinta años, los químicos van a invadir la biología que va a dejar de ser una ciencia de modelos cualitativos para convertirse en una disciplina cuantitativa y rigurosa sin perder la "espontaneidad" que caracteriza tanto a la química como a la biología.

Creo que hay una gran confusión entre complejidad y dificultad teórica. Como esa confusión está en el corazón del debate entre químicos y biólogos, voy a ilustrarlo con otro ejemplo. Cuando se lanza una moneda al aire, se trata de un proceso totalmente determinista (Laplaciano), cuyas leyes (ya que se trata de un objeto macroscópico) obedecen a la mecánica clásica. Sin embargo, la complejidad es tal, que se considera un proceso aleatorio. ¿Tendría sentido un programa de investigación en físico sobre las leyes que rigen el movimiento de la moneda? Pues evidentemente, no. ¿Es pensable que en un futuro, incluso lejano, se pueda predecir si va a salir cara o cruz? Pues tampoco.

Decía que no creía que la física fuese a invadir el dominio de la química y ello por muchas razones una de las cuales, y no la menos importante, es que a los físicos no les interesa la química. De acuerdo con Theobald y con Wold, pienso que los universos conceptuales de la física y de la química están muy alejados. Ya sé que hay zonas de contacto (la espectroscopía molecular, por ejemplo) pero estamos trotando de buscar grandes principios. Cuando uno lee las *New Physics* de Paul Davies queda bien claro que el futuro de la física, según los físicos, poco tiene que ver con el de la química. Seamos más atrevidos: no va a surgir una técnica espectroscópica nueva tan potente como la RMN. Lo que quizás si sea posible es una tercera revolución en RMN, después de los secuencias de pulsos (la segunda revolución), podría venir un aumento espectacular en sensibilidad, por ejemplo, una ganancia de 50.000, lo cual cambiaría la química (cualquiera puede imaginar las consecuencias de un acoplamiento HPLC-RMN).

La física ha hecho dos contribuciones esenciales a la química: la mecánica cuántica y la RMN. Los problemas de mecánica cuántica que interesan a los físicos (teorías de gran unificación y cosas así) no nos conciernen. Y no creo que haya aparecido algún trabajo que vaya a dar lugar a una nueva técnica espectroscópica o espectrométrica en los próximos diez o veinte años tan "revolucionaria" como la RMN. Conclusión: poco que esperar de la física y de los físicos.

Ninguna idea química nueva que esperar de los biólogos, poco de los físicos. ¿Entonces? Bueno, pues yo creo que los que sí pueden aportar algo fundamental a lo química son los matemáticos. Incluso, algo ya publicado. Catástrofes de René Thom, Fractales de Benoit Mandelbrot, el Caos de Kolmogorov y de Lorentz. Quizás los matemáticos de nuestro tiempo se han impacientado (¡hasta los matemáticos se han contagiado con el afán de rentabilizar sus investigaciones!) y han intentado "vender" sus teorías como si sirvieran para todo y eso les ha desprestigiado un poco ya que da una impresión de forzar los hechos para que entren en sus teorías, pero, esas u otras teorías quizás ya conocidas pueden cambiar profundamente la química.

Cuando se piensa en RMN se piensa en físicos, en Purcell, en Bloch, en Ernst, pero ¿qué sería la RMN (y el IR y muchas otras espectroscopías y espectrometrías) sin la transformada de Fourier y, más recientemente, sin la transformada de Hilbert? Intenten imaginarse la química sin los nombres de Hamilton, Hermitte, Laplace, Gauss.

## 4. Aspectos políticos y administrativos

No es posible eludir la influencia de los aspectos administrativos y políticos en una reflexión sobre la química. Aunque la "tentación de la torre de marfil" está siempre presente, sino consciente sí al menos inconscientemente, en todos los científicos, los químicos suelen resistir mejor a ella por estar más inmersos en las realidades sociales. Es difícil que a un químico se le olvide la realidad social que le arropa, le crítica y le mantiene. Para hacer química hacen falta recursos, paz social,

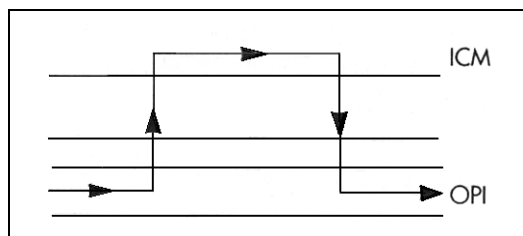
perspectivas económicas, trabajo para los graduados y doctores, un salario digno, y una estructura administrativa y eficaz.

En este aspecto la situación en España es aceptable en espera de que se vuelva satisfactoria. Pero quizás el punto más negro sea la distancia, cada día mayor, entre una investigación pública (universidades y CSIC) cada día más floreciente y una investigación privada que no progresa al mismo ritmo. Nuestra esperanza está en que a medida que las plantillas se van llenando de buenos profesionales (ese es nuestro objetivo y nuestra satisfacción) la importancia de la investigación vaya creciendo en las empresas.

Debemos hacer un ejercicio de modestia: una situación económica sana permite desarrollar una investigación de calidad. Lo contrario no es verdad: una investigación de calidad no es condición suficiente para una economía satisfactoria. El presupuesto en I+D de los países desarrollados oscila entre un 1 y 3% del PIB. Eso permite mantener un nivel de investigación aceptable dentro de una mala situación económica. Aunque el libro Blanco de Jacques Delors cita las inversiones en investigación básica y en desarrollo como una de las condiciones para que Europa no "pierda el tren" con respecto a EEUU y a Japón, los gobernantes no deben esperar que la investigación "tire" de la economía. Es algo mucho más complicado. La dignidad de un país le obliga a mantener un nivel científico proporcional a sus otros indicadores de importancia global y bienestar social. La ciencia es un elemento positivo. Y los gobiernos así lo deben entender, pero no se les debe prometer que las sumas que van a invertir en investigación las van a recuperar a corto plazo. Al menos no en regalías, patentes y balance de pagos. Pero seguro que sí en cultura, dignidad y respeto para su pueblo.

Dicho de otra manera, está claro que el factor limitante del crecimiento y del avance de la química orgánica en España es el desarrollo empresarial: ¿Cómo pedir al Gobierno que dupliquemos en personas y medios la situación actual si la química en el sector productivo no crece? Desgraciadamente, no podemos decir "Si la Química Orgánica dobla en las Universidades y el CSIC, doblará en las empresas". No es verdad. No son cosas independientes, claro está, pero no hay una relación causal entre ellas.

Creo importante defender una idea que me parece cada vez más importante. No tanto un segundo salto (eso irrita a muchos buenos químicos españoles que hacen todo lo que pueden), ni el cambiar cantidad por calidad de las publicaciones (eso es ignorar lo testaruda que es la ley normal). No, lo que me gustaría defender es la creación de un *Instituto de Ciencias Moleculares* (ICM), donde se haría investigación de muy alto nivel. El modelo del ICM no sería tanto el ETH de Zürich, sino el IMS de Japón: un centro de unas 100-200 personas, con medios considerables (infraestructura y personal auxiliar), pero un centro de paso. Cualquier investigador-doctor (Universidades, Organismos Públicos de Investigación (OPIs), españoles o iberoamericanos) podría solicitar su ingreso en el ICM en cualquier momento de su carrera. Pero para tener una promoción tendría que irse de allí. Algo así:



Sé que es un sueño. Pero hay que empezar a soñar. Hace falta un centro de referencia. Algo como el Centro de Biología Molecular "Severo Ochoa" en biología molecular. Algo entusiasmante, de lo que la química española carece debido a su desarrollo en paralelo. Algo por lo que, todos juntos, luchar.

José Elguero Bertolini, Profesor de Investigación, Instituto de Química Médica, Consejo Superior de Investigaciones Científicas.