

- 15 J. Elguero
« El paper de la química en el segle XXI », en *Reptes de la ciència a les portes del segle XXI*, Barcelona, 1995, p. 19-24.

LA CIENCIA DEL FUTURO *Física / Química / Matemáticas / Tecnología*
(Barcelona, 20 de abril de 1994)

El papel de la química en el siglo XXI

Preámbulo

Hay personas que, con la loable intención de animar la posterior discusión, mantienen un discurso agresivo y provocador. No es en absoluto mi deseo. Lo que voy a decir refleja exactamente mis convencimientos y no quiero, de modo alguno, ser molesto. Sólo ser claro.

1. El pasado como modelo del futuro

a) *La extrapolación.* ¿Con qué derecho puedo yo hablar de la química en el siglo XXI? El único que se me ocurre es el de haber dedicado cuarenta años del siglo XX a ella. Ello implica una cierta confianza en la extrapolación de un modelo, tema particularmente delicado en estadística. Se ha dicho, medio en broma, que el mapa más detallado de Londres no permite viajar por Escocia. Y eso se refiere a la extrapolación espacial. La temporal es mucho más difícil: ¿Cómo extrapolar nuestra experiencia hacia el futuro?. Dos o cinco años más allá, quizás; más lejos, la predicción se vuelve totalmente borrosa. Quiero decir que no me hago ilusiones ni intento engañarles sobre el valor de las extrapolaciones que van a seguir.

b) *1958-1994: 37 años de química orgánica.* Cuando llegué a Montpellier, en 1958, a hacer mi Doctorado, el químico orgánico más prestigioso de aquel entonces se llamaba Max Mousseron. Estaba al final de su vida profesional activa, debía tener la edad que tengo yo ahora. A veces imagino que lo hubiesen hibernado en 1958 y que se despertase hoy. ¿Se sentiría perdido en uno de nuestros laboratorios? No. Le costaría unos días (o unas semanas) de adaptación, pero no tendría ningún choque cultural: la química de 1994 es perfectamente comprensible para un químico de 1958.

¿Quiere esto decir que no ha pasado nada? Pues obviamente, no. La cultura química ha cambiado. Ahora, los doctorandos no sólo no saben lo que es un Kumagawa; muchos, ¡ni siquiera saben lo que es un Kitasato! Pero es un cambio más bien sociológico que conceptual. *Mutatis mutandi*: si me hibernasen hoy y me despertasen en el 2030, necesitaría unos días (o unas semanas), pero no me encontraría perdido en el laboratorio de alguno de los que me están oyendo. Eso, al menos, creo.

Me parece que nada deja presagiar una "revolución" (en el sentido Kuhniano) de la química. Quiero decir, un cambio de tal envergadura que las personas de mi edad no se podrían adaptar a él. Porque pequeñas revoluciones, todos hemos conocido. Lo que suele ocurrir es que una vez aceptado el nuevo modo de ver las cosas, se "olvida" la antigua manera de pensar. Ejemplo de una revolución que está ocurriendo en estos mismos momentos: si se confirma que la úlcera de estómago es una enfermedad infecciosa eso va a obligar a un giro "copernicano" de nuestra manera de combatir tal enfermedad. Yo confieso que me da vértigo tal posibilidad: un enorme edificio, uno de los más bellos de la química terapéutica, se derrumbará. ¡Cuando se piensa que ciertas empresas farmacéuticas han hecho unos enormes beneficios combatiendo la úlcera gastrointestinal con antihistamínicos H₂ o con inhibidores de la bomba protónica, más recientemente!

2. La química y la biología

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 sí va a invadir el de la biología.

¿Qué puede esperar la biología de la química? Todo. ¿Qué puede esperar la química de la biología? Nada. Bueno, apenas 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 postulemos 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 complicado pero sin misterio. Es más un problema de supercomputación que de ideas nuevas (ideas químicas nuevas, quiero decir). ¿Que 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 rudimentarios 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 ilustrarla 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 le considera un proceso aleatorio. ¿Tendría sentido un programa de investigación en física 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.

3. La química y la física

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 tratando 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 sí sea posible es una tercera revolución en RMN, después de las 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 (se puede imaginar los frutos 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.

4. La química y las matemáticas

Ninguna idea nueva que esperar de los biólogos, poco de los físicos. ¿Entonces? Bueno, pues yo creo que los que sí pueden aportar algo fundamental a la química son los matemáticos. Incluso hay 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 las cosas 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.

Conclusiones:

1. Dice Sir Peter Medawar que si la política es la ciencia de lo posible, la investigación es la ciencia de lo soluble. Hay infinidad de problemas biológicos fundamentales que la química no puede resolver. Abordarlos hoy día sería locura estéril. Dejemos a los biólogos avanzar con sus métodos, ya los estudiaremos cuando estén maduros.
2. Desarrollo de los cálculos teóricos en calidad (límite HF) y en cantidad (macromoléculas biológicas).
3. Estudio de las fuerzas débiles, modelos abióticos, química supramolecular.
4. Resolución de la estructura molecular de sólidos policristalinos y predicción *ab initio* del empaquetamiento cristalino (es decir, de sus propiedades físicas en estado sólido).
5. De las matemáticas ya he hablado.
6. Instrumentación. Es difícil saber al principio de un sendero cuál se irá estrechando y cuál se convertirá en una gran avenida.
7. El objeto de la química debe estar dentro de la química. Sacarlo fuera y ponerlo, por ejemplo, en la biología sería (es) un gravísimo error. Es lo que en ciencias sociales se llama alienación. Desgraciadamente, eso está sucediendo y los químicos están pagando las consecuencias de que se les juzgue por lo que contribuyen a otras ciencias y que les juzguen especialistas de esas otras ciencias (se llamen ciencia de materiales o biología). El reino de la química es lo artificial. Imitar la naturaleza es insuficiente y puede incluso ser erróneo: ¿es que acaso los aviones derivan del modo de volar de los pájaros? Lo natural es propio de los animales, es el resultado de la evolución. Han sido necesarios millones de años para conseguir el vuelo del gavián y sólo unas decenas para conseguir un avión supersónico.