

- 6 J. Elguero
«La química española actual», Ponencia de apertura, en *Tendencias actuales en química*, CAICYT/CSIC, Santander, 1985, p. 9-16. Encuentros en la Universidad Internacional «Menéndez Pelayo» (UIMP), 3-5 de julio de 1985.

INTRODUCCIÓN

Voy a expresarme con la franqueza de una persona que no tiene responsabilidades administrativas. Lo que aquí diga no representa más que una opinión personal no contrastada. En fin, por una vez, voy a pasar por alto los aspectos positivos del desarrollo de la Química en España en los últimos cinco años para centrarme en los aspectos negativos. Aquí estamos entre químicos y no necesitamos defendernos corporativamente.

CONSIDERACIONES GENERALES

Permítaseme en esta sesión de apertura tratar de un problema ético y de la amenaza que se cierne cuando un pequeño colectivo se reúne para definir prioridades y diagnosticar la situación de una disciplina científica. El problema ético es el de transformarse un grupo de trabajo en un grupo de presión. La amenaza es la de caer en la trampa de sobrevalorar nuestras propias líneas de trabajo. En mi barrio está la casa de Lope de Vega; en el dintel de su puerta, Lope hizo escribir «Parva propia magna, magna aliena parva» (Lo pequeño propio nos parece grande, lo grande ajeno nos parece pequeño). Que no se nos olvide esta frase.

Creo que la única manera de evitar distorsiones que entorpezcan el desarrollo de la Química en España y abusos que empañen el prestigio de nuestros investigadores más eminentes es *ampliar y renovar*. El conjunto de personas que deciden el porvenir de nuestra disciplina (censores, evaluadores, comisiones, juntas de gobierno, asesores...) debe ser lo más amplio posible dando rápidamente entrada a los elementos más jóvenes. Con una base amplia donde escoger, se deben renovar las personas con relativa frecuencia (evitando una permutación circular). Nada más sano que ser juzgado después de haber sido juez. Es difícil, todo el mundo conoce las irregularidades que se producen en el juicio por pares, pero se debe intentar.

ASPECTOS CIENTIFICOS

Para simplificar, se puede decir que el desarrollo reciente de la Química en España corresponde más a un crecimiento en cantidad que a un aumento de calidad. Las revistas de nivel medio están llenas de publicaciones españolas. ¿Podemos esperar que la acumulación de trabajos medios lleve a algunos trabajos excepcionales? Yo creo que corremos el peligro de quedarnos en un techo bajo. Los crecimientos son más espectaculares cuando se parte de muy abajo, como ha sido nuestro caso. Ahora empieza lo difícil, ahora la «etapa limitante» ya no va a ser los créditos, la instrumentación, las bibliotecas, sino los hombres. Los hombres, es decir, su formación científica y humana, su entusiasmo, su porvenir.

De una manera general, los temas de investigación, tal como se reflejan en publicaciones, congresos y peticiones de ayudas y becas, muestran una enorme proporción de temas clásicos (por no decir anticuados) y una falta de agilidad para reaccionar ante la situación cambiante.

De las cuatro ramas de la Química aquí presentes, yo diría que la Química Orgánica es la que tiene el nivel más homogéneo; la Química Inorgánica de calidad se concentra en tres o cuatro sitios; la Química Física es aceptable a nivel de métodos instrumentales y claramente deficiente en termodinámica; finalmente, la Química Analítica española es un desastre. He dejado aparte la Química Cuántica, que yo diría que está por delante en calidad y cantidad relativa.

De la Química Orgánica hablaré luego con un poco más de detalle. Pero antes de desarrollar el juicio rudo sobre las otras ramas, hay algo general que decir. Existen demasiados muros entre ellas. Algunos pasadizos han sido abiertos por los investigadores, pero aún así, la situación global es muy compartimentada y ello es en gran parte responsable de nuestros problemas de calidad. El químico que no quiera ser más que químico orgánico no será absolutamente nada.

De esta compartimentación son responsables los planes de estudio, las áreas de conocimiento demasiado pequeñas, la reticencia a formar parte de Institutos o Departamentos interdisciplinarios (¿si ello cabe, tratándose de química!). ¿Qué Universidad española será la primera en dar ejemplo de una enseñanza integrada de la Química? Bien vendría a muchos químicos orgánicos reflexionar sobre los compuestos de valencia mixta y a muchos inorgánicos sobre la inversión de Walden. Y la catálisis, qué es, Orgánica (catálisis micelar, catálisis por transferencia de fase), Inorgánica (catálisis homogénea), Química-Física (cinéticas, superficies) o Bioquímica (catálisis enzimática)? Lo mismo ocurre con los polímeros, los metales sintéticos y muchos otros temas que no por casualidad se encuentran entre los más interesantes y prometedores. A mí me gustaría que de estas jornadas surgiera un apoyo claro a toda iniciativa interdisciplinaria o intersubdisciplinaria, tanto en el CSIC como en las Universidades.

A mi modo de ver, el mayor problema de la Química Inorgánica española es que la practican casi exclusivamente químicos inorgánicos. Les falta una visión estereoquímica, mecanística de las reacciones. Tienen casi por completo abandonado el estudio de la reactividad «orgánica» del ligando en el complejo. Se decantan excesivamente hacia la Química de Coordinación en detrimento de la Química Organometálica (juntando orgánicos e inorgánicos, ¿dónde están los buenos especialistas de boro, silicio, fósforo o flúor?). A ello se debe que no estemos contribuyendo al uso de la catálisis por transferencia de fase en compuestos organometálicos (Alper) o la muy prometedora línea de activación por transferencia monoeléctrica (DAISET, Double Activation Induced by Single Electron Transfer; Rusell, Tobe, Chanon). Si bien los químicos orgánicos han reaccionado al descubrimiento de la sonoquímica, los inorgánicos no lo han hecho, aunque los ultrasonidos sean particularmente eficaces en medios heterogéneos.

El caso de la Química-Física es complejo, por la diversidad de orientaciones que pueden tomar.

Ya he dicho que el nivel de la Química Cuántica es bueno, aunque hay demasiada gente en reactividad orgánica (reacciones concertadas), en estudios espectroscópicos, mientras faltan grupos en Química de Coordinación y, sobre todo, en Estado Sólido (metales). Además, la contribución española a métodos de cálculo es nula: los nombres españoles (M. Yáñez, S. Olivella, C. Jaime) aparecen sólo como colaboradores de Pople, de Dewar o de Osawa. Más adelante volveremos al problema de la creación de «software». Examinemos ahora el estado de las técnicas instrumentales: en España no se crean ni se modifican instrumentos pesados. Los difractómetros de rayos X, los espectrómetros de masas o RMN, los infrarrojos de transformada de Fourier o las Raman se compran y se usan tal como llegan. Naturalmente, así es difícil hacer algo original: perforar una sonda de RMN para hacer llegar una excitación luminosa (CINDP), montar una sonda (no comercial) para estudio de RMN en fase vapor, modificar la geometría de un espectrómetro de masas o añadirle un segundo sector magnético son cosas que no se hacen. Aquí sólo se hace espectroscopía «comercial». Y, muchas veces, ni siquiera eso. Mientras España se encuentra «llena» de aparatos de RMN superconductores usados en trabajos de rutina, están abandonados la resonancia cuadrupolar, el uso de fases nemáticas y los núcleos «exóticos». Igualmente ocurre con la espectrometría de masas: se han repartido generosamente aparatos «analítico-orgánicos» de rutina y no hay donde hacer química-física de la fase gaseosa (high pressure mass spectrometry; tandem ms/ms; MIKES, ...). En fin, es necesario tener al menos un aparato en España para sólidos (previsto en el CSIC); un ICR (la química en estado gas está muy descuidada); espectroscopios fotoelectrónicos (tanto UPS como XPS) que proporcionarían información complementaria sobre las

moléculas en fase gas; microondas; difracción de electrones; e incluso, mucho más modestamente dipolarómetros.

También faltan en este país químicos-físicos trabajando en relaciones extratermodinámicas, con la triste consecuencia de que estas cuestiones las traten químicos orgánicos, con las consiguientes barbaridades a nivel de tratamiento estadístico de datos. Piénsese en la extraordinaria importancia de la línea que están desarrollando Kamlet y Taft sobre la modelización de la solubilidad, que debería conducir a predecir la solubilidad de un compuesto X antes de sintetizarlo. ¡Qué sueño para los que intentan hacer compuestos biológicamente activos! Hay que crear una escuela, una tradición de «physical organic chemistry», de quimiometría.

He sido muy severo con la Química Analítica. Es preciso aclarar que en todo lo que he dicho y en lo que diré hay olvidos, errores y excepciones. Se podrá objetar que tal instrumento ya es operativo o que en tal línea se está trabajando. Por un lado, estas notas rápidamente hilvanadas no resultan de una encuesta rigurosa sino de una opinión. Sé que hay grupos de Química Analítica españoles que están publicando en las mejores revistas de la especialidad. Revistas que yo sólo ojeo, generalmente en busca de trabajos de optimización (en la línea de Deming y Morgan) o de análisis de datos (en la línea de Massart), donde, por cierto, nunca encuentro trabajos españoles. Una vez más, nuestra contribución a las aplicaciones de los ordenadores en la investigación química es insignificante. Sí que leo lo que los analistas españoles publican en Anales de Química y es desalentador. Al principio de mi vuelta a España escribí unas cuantas veces para señalar errores groseros a los autores de trabajos ya publicados. Ante las reacciones, renuncié.

A nivel docente, la Química Analítica es imprescindible. La razón es sencilla: hay necesidad de analistas en las empresas, en los laboratorios municipales y autonómicos, en los centros nacionales de control. La labor que se les pide no suele ser muy cualificada; desde luego no se necesita un doctorado. Hay, pues, que formar analistas. Pero, ¿hay que hacer investigación en Química Analítica? Cuando se examinan los trabajos de Química que más impacto tienen ninguno es de Química Analítica. A menos que se considere Química Analítica el descubrimiento de los LSR y su aplicación en RMN o la introducción de la técnica FAB en espectrometría de masas. Porque lo que ha cambiado la Química Analítica es la RMN o la GC-MS (HPLC-MS) y no las reacciones coloreadas. El origen del problema quizás esté en que mientras la Química Orgánica ha contado con nombres como Lora Tamayo, Pascual Vila o Ribas Marqués, que comprendieron a tiempo la evolución de su disciplina, no ocurrió lo mismo en Química Analítica. Hay una tradición de Química Analítica mediocre que va a resultar difícil de romper.

Le llega el momento a la Química Orgánica. Vamos a repartir nuestros comentarios entre lo que se hace y no se debería hacer y lo que sería deseable que se hiciese y no se hace o se hace poco. Una vez tuve que preparar una conferencia para la reunión del grupo de Orgánica de nuestra Sociedad celebrada en La Toja. Tenía que tratar de metodología de la investigación. La metodología se aplica cuando hay un problema que resolver. Para ilustrar mi charla con ejemplos de los oyentes, decidí apoyarme sobre lo que habían publicado en Anales en los últimos cinco años. Cuál no fue mi sorpresa al ver que, en la mayoría de los casos, la metodología era inaplicable porque *¡no había problema!* Se trataba de una química de constatación, descriptiva, más cercana a las Ciencias Naturales que a la Física. Si se admite que las ciencias avanzan matematizándose, se trataba de una Química del siglo XIX hecha con técnicas casi del XXI. En muchos casos consistía en hacer reaccionar, por primera vez, dos productos conocidos A y B. Se obtenía así C, cuya reactividad se estudiaba y así sucesivamente. Como el conjunto de productos orgánicos es infinito, tal actitud puede durar mucho tiempo y, de hecho, en algunos sitios lleva durando decenas de años.

Otro ejemplo típico de Química correcta pero pobre en información se encuentra en la especialidad de Productos Naturales. El extraordinario desarrollo de las técnicas de separación y de elucidación estructural han transformado a la Química de Productos Naturales «analítica» en una de

las ramas más fáciles y rutinarias. Dejando aparte la síntesis total, de la que luego hablaré, hay un campo apasionante: el de las sustancias naturales de los organismos superiores. ¿Por qué hay tan pocos discípulos de Schally o de Guillemin en España? Aquí hay buenos bioquímicos y buenos biólogos moleculares; en colaboración con ellos se podría trabajar, por ejemplo, en la búsqueda del neurotransmisor de la ansiedad.

Eso me lleva naturalmente a otro campo que habría que reducir: el de las sustancias químicas con actividad biológica potencial. Contrariamente a una opinión no por muy generalizada menos falsa, lo difícil no está en sintetizar una molécula activa (se publican centenares cada semana), sino en el paso entre molécula activa y fármaco. Sólo se deberían incitar dos tipos de proyectos en relación con el medicamento: los de diseño original y los concertados con la industria. También cabría considerar, en la frontera con los productos naturales, las síntesis complejas de polipéptidos, ácidos nucleicos, antibióticos poliénicos o macrocíclicos, neurotoxinas, etc. Lo que los centros públicos no deben hacer es imitaciones de fármacos conocidos, no sólo porque no llegarán nunca a un producto comercial, sino porque al publicarlo (o patentarlo) lo destruirán. Las revistas están llenas de productos interesantes que jamás serán desarrollados por haber sido publicados.

Me gustaría hablar de una serie de temas de investigación que desearía ver tratados en España. Se trata de una lista personal e incompleta que resulta, de una parte, de lo que uno lee en revistas extranjeras y, de otra, de lo que uno lee como censor o evaluador. Ahí van en el desorden en que han llegado a mi memoria.

Empezaré por las síntesis totales. Por su impacto en la comunidad científica y por la generación de nuevos conceptos es la categoría reina de la Química Orgánica, Woodward, Corey, Evans, Seebach, Eschenmoser, Djerassi, ... ¡Ah, pero no cualquier síntesis total! La síntesis larga y laboriosa de un producto de interés menor por métodos ya descritos, o sencillamente adaptados, ni modifica la Química Orgánica ni será muy citada. El problema es que, si el producto vale la pena, el grupo español se va a encontrar en competencia con los núcleos más fuertes de Química Orgánica mundiales. Así, salvo si contienen una idea *original*, tales proyectos deben ser examinados con circunspección. Pero si hay una idea original (es decir, que no se le «ocurra» al programa LHASA de Corey), en el uso de un precursor barato o usando una reacción *propia* del grupo, entonces se les debe dar un apoyo decidido.

A continuación, una serie de temas inconexos: estudios dinámicos en fase gaseosa (determinación de energías de activación de procesos intra o intermoleculares); reacciones bajo altas presiones; química a muy bajas temperaturas (incluidas separaciones cromatográficas y estudios estructurales); termólisis «flash» y generación de especies de estructura muy original; transferencia de fase en medios no acuosos (amoníaco líquido, siliconas); reacciones en estado sólido...; cualquiera de estos temas merece más atención.

Algo más estructurado es todo lo que gira alrededor del eje «informática-química»: inteligencia artificial (sistemas expertos), estadística, tratamiento de datos, diseño de experimentos, diseño de fármacos asistido por ordenador, nuevas secuencias de pulsos para RMN; interfases; automatización de las síntesis (robots) (muy usado ya en las grandes empresas farmacéuticas); relaciones QSAR; etc.

También, todo lo que se integra en Química Supramolecular: canales iónicos, cavidades, zeolitas, ciclodextrinas, modelización cuántica de las interacciones débiles, clatratos, ...

Otro gran conjunto lo forman los temas más aplicados de los materiales (cristales líquidos, metales orgánicos, conductores monodireccionales) y de química fina (edulcorantes, aromas...). Son temas que se trabajan ya pero que se deberían desarrollar. Curiosamente, parece que el «hacer» un fármaco es más noble que el sintetizar un aroma de puré de patatas. Hay que poner las cosas en

su sitio y decir a los químicos que tienen vocación de investigación aplicada que, tal como está la legislación sanitaria, les convendría dirigirse hacia otros temas más factibles y rentables (no es casualidad que las grandes multinacionales farmacéuticas estén diversificando sus intereses y ocupándose de cosmética, alimentación, medicina veterinaria, fitosanidad...).

Ya sólo me queda un tema al que ya he aludido: el de la selectividad y la activación. El principio de reactividad-selectividad indicaba al investigador que no debería esperar una reacción muy rápida y, al mismo tiempo, muy selectiva. Pero toda prohibición es un desafío. Y los químicos han conseguido disminuir las energías de activación conservando la selectividad. Basta con diseñar el catalizador adecuado. La Catálisis es un tema clave que pide la colaboración de todas las ramas de la Química, pues en todas interviene. En España la Catálisis parece un espejo roto: trozos de calidad incapaces de restituir una imagen coherente.

ASPECTOS ADMINISTRATIVOS

No es posible eludir los aspectos administrativos y pericientíficos. No trabajamos en el mejor de los mundos posibles. Empecemos por un aspecto que puede parecer secundario pero que tiene su importancia: Anales de Química. Creo que nadie puede discutir que tengamos nuestra revista, así es que nuestra única posibilidad es mejorarla. Creo que debe cambiar su presentación para acercarse a las mejores revistas europeas, publicar más artículos y más rápidamente. La barrera de selección debe aumentarse muy progresivamente, pues una brusca elevación de las exigencias de calidad puede destruirla por insuficiente volumen total (eso le ocurrió al Bulletin de la Société Chimique de Francia y está costando mucho volver a la situación inicial). La razón es obvia: cuando los investigadores mandan todos sus trabajos interesantes fuera y guardan para la revista nacional los peores, el nivel de la revista está por debajo del nivel del país. Contribuye también a su deterioro el que se considere un artículo publicado en Anales como menos meritorio que otro publicado fuera. En fin, es evidente que, a calidad igual, un trabajo publicado en Anales, en cualquier idioma, tiene una difusión y un impacto mucho menor que en otras revistas, internacionales o de sociedades químicas extranjeras. El diagnóstico es fácil y claro. ¿Y el remedio? Aparte de los ya indicados (presentación, masa crítica y rapidez) y de algún punto trivial (como la supresión de la ridícula costumbre de mandar al censor un ejemplar «censurado» –sin el nombre de los autores–) poco podemos hacer aquí. Yo, de todos modos, pediría que todos los buenos centros de química se comprometieran a enviar a Anales un par de artículos de calidad al año, si es posible formando parte de una línea de trabajo, de manera que fuesen conocidos por las citas. Habría, además, que hacer un esfuerzo de difusión de las separatas correspondientes, por ejemplo, enviándolas cuando nos pidan un trabajo relacionado.

Examinemos ahora como debería ser la financiación para asegurar un buen funcionamiento a la investigación española. Para mí, el sistema ideal es el que asegura un mínimo vital a todos los grupos existentes y concede una financiación importante a un número muy reducido de grupos. El mínimo vital evita las injusticias personales (y personalizadas) y la inevitable miopía de los evaluadores. Evita, como dicen los franceses, «tirar el niño con el agua sucia». Sé que es una decisión costosa, pero, a mi modo de ver, es la única defendible. Si selección tiene que haber, no debe ser consecuencia de la financiación, sino de instancias más generales que planifiquen el número y la distribución de los equipos de investigación.

La financiación selectiva ya es un instrumento suficientemente potente para orientar las líneas de investigación. Es mucho menos peligroso equivocarse potenciando una línea de moda sin futuro que condenando un tema «poco interesante» que se revela años más tarde como el embrión de un pensamiento innovador. Yo creo que el papel de la CAICYT debe limitarse a la financiación por programas. Aún con la garantía de que nadie «desaparecerá», los riesgos de equivocarse son grandes. Hay riesgos científicos y riesgos humanos. De los riesgos científicos ya hemos hablado. Me gustaría decir una palabras de los riesgos humanos. Dejando de lado, por anecdótico, las

numerosas interacciones, positivas o negativas, entre personas, a mi me parece que el riesgo mayor proviene del «Parva propria magna, magna aliena parva». Meditando sobre esta cuestión, he llegado a la conclusión de que es un error hacer responsables de la distribución de la financiación a los científicos mejores y más dinámicos: irremediablemente van a priorizar sus líneas de trabajo, lo contrario sería suicida. También sería erróneo entregar esta responsabilidad a los científicos principiantes o menos sensatos. Creo preferible que formen parte de los órganos decisorios personas que por su edad, vocación o especialidad científica no sean demandantes de mucha financiación. Por ello es frecuente ver a un matemático en puestos de responsabilidad, Eso, unido a una renovación parcial frecuente, puede ser una solución. Al menos, debe ser contemplada. Decía Adlai Stevenson: «toda persona lo suficientemente ambiciosa para desear ser Presidente de los Estados Unidos es indigna de ocupar tal puesto».

Me queda, para concluir, hablar de las relaciones con la industria. Hay que transformar radicalmente la situación actual. Espero que el artículo 11 de la LRU permita llegar a una situación más europea, en la que un catedrático o un investigador del CSIC no sólo no oculte sus funciones de asesoría técnica, sino que esté orgulloso de ellas y las pregone como méritos. Eso clarificaría la situación actual y favorecería la colaboración entre el sector público y el sector privado, tema tan frecuente pero tan superficialmente abordado. A nadie debe ocultársele que las empresas españolas no usan ciencia española en su investigación. Eso es una simple consecuencia de la proporción con que España contribuye a la ciencia mundial. ¡Ah, si el problema de Sagunto dependiera de la investigación que se hace en una cátedra de metalurgia! Hay que ser honrados: la situación económica española no depende a corto plazo de la investigación. Sin embargo, una economía floreciente nos daría, sin duda alguna, más medios para investigar.

Debemos luchar para obtener mejores condiciones de trabajo porque creemos que es bueno para España a corto plazo (mayor prestigio y más fácil transferencia del saber al sector productivo), a medio plazo (formación de profesionales para el sector industrial, creación de empresas de nueva tecnología) y a largo plazo, pues por nuestros centros, y no me refiero ahora exclusivamente a la Química, pasarán los futuros responsables de nuestro país.

Post-scriptum.— El texto anterior es, sin modificación alguna, el que fue leído en la sesión de apertura del encuentro «Tendencias actuales en química». Su objeto era lanzar una discusión franca y crítica. De ello, su carácter maniqueo y provocador. Después de tres días de ponencias especializadas y de animada discusión, habría que haberlo reescrito completamente. He preferido dejarlo tal como está, esperando que el lector perdone las deficiencias, los excesos y las contradicciones. Si no es bueno, es bien intencionado.