



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Investidura como "Honoris Causa" por
la Universitat de València a José
Ignacio Fernández Alonso

Discurso de aceptación

Valencia, 7 de marzo de 1988

Magnífico y Excelentísimo Señor Rector
Excelentísimas e Ilustrísimas Autoridades
Estimados Colegas y Amigos Señoras y Señores

Es para mí un gran honor recibir la alta distinción de Doctor Honoris Causa que me ha concedido la Universidad de Valencia a petición de su Departamento de Química Física. Quiero, pues, que mis primeras palabras sean la expresión de mi más profunda gratitud por vuestra generosidad.

Esta investidura, además de ser una gran honra, tiene para mí un profundo significado, porque se debe a la iniciativa de los que fueron, hace muchos años, mis discípulos, colaboradores y amigos, y que, actualmente, pertenecen a un Departamento, que si hoy ya es una gran realidad, su futuro es aún más prometedor. Para todos sus miembros, mis más calurosas gracias. A propósito de esto, me vienen a la memoria unas palabras que le escuché al Profesor Laín Entralgo en esta Universidad, hace muchos años. Decían así: "Mal Maestro es aquel que, llegada una época de su vida, no sea discípulo de sus discípulos. Mal Maestro es aquel que, llegada una época de su vida, no sea Maestro de sus Maestros".

Por último, expreso mi sincero agradecimiento a mi antiguo colaborador, querido amigo y colega. Profesor Francisco Tomás, por su gentileza al presentarme en este acto solemne.

CONTRIBUCIÓN A LA QUÍMICA TEORÍA ESPAÑOLA

Un día, mediado el mes de septiembre del ya lejanísimo 1945, llegaba a Valencia para incorporarme a la cátedra de Química Física de la Facultad de Ciencias, que había ganado poco antes. Me encontré con una realidad desoladora: al no haber medios y no disponer de dotación alguna, era imposible investigar en el dominio de mi especialidad. Tenía una formación experimental sólida, adquirida en la Universidad Compostelana bajo la dirección de mi Maestro, el Profesor Tomás Batuecas y quería servirme de ella.

Después de años de esfuerzo y tras superar no pocas dificultades, establecimos tres líneas de investigación experimental. La primera publicación apareció en 1950.

Había en mí, sin embargo, una tendencia innata hacia los estudios de Química teórica y publicado, en 1943, mi primer trabajo en este campo. Ya en Valencia, tomé la decisión firme de salir al extranjero para formarme en la especialidad de Química cuántica. El curso 1950-51 lo pasé en París, trabajando con el jovencísimo Raymond Dauder, Secretario del Centre de Mécanique Ondulatoire de France. El de 1951-52 en el Instituto Tecnológico de California, como Research Fellow in Chemistry, investigando bajo la dirección del Profesor Linus Pauling, ya en la recta final hacia su primer Premio Nobel, que recibió en 1954.

He dividido mi exposición en dos partes: período valenciano y período de la Universidad Autónoma de Madrid.

PERÍODO VALENCIANO (1952-1971)

Cuando regresé a Valencia, en octubre de 1952, en el Departamento se continuaba trabajando en las tres líneas de investigación ya indicadas.

Iniciamos inmediatamente las investigaciones en el dominio de la Química cuántica. En una primera etapa, que abarca la década de los cincuenta utilizamos, primordialmente, dos métodos empíricos electrónicos: el de Hückel y el FEMO (electrón libre).

El método de Hückel usado no era el simple y habitual, sino uno más elaborado y fundamentado, que yo había desarrollado durante mi estancia en Francia; incorporaba, en ciernes, algunos de los elementos básicos de los métodos más sofisticados posteriormente desarrollados. Sin embargo, ya en esta década comenzamos a utilizar una metodología más avanzada, concretamente en el estudio de la molécula de antraceno, que consistió en el uso de la interacción de configuraciones.

El paso siguiente, en el que empleamos la metodología más sofisticada, los llamados métodos semiempíricos y no empíricos, se realizó en la década de los sesenta. Esto implicó tener acceso a los sistemas de cálculo automáticos -los ordenadores-, lo cual, visto desde la perspectiva de nuestros medios, era imposible. Tuvimos, pues, necesidad de solicitar ayudas externas que, afortunadamente, fueron atendidas.

Las necesidades de cálculo se hicieron tan apremiantes, que planteamos ante la Universidad la perentoria adquisición de un ordenador.

Merced a ciertas ayudas se instaló en el Departamento de Química Física de la antigua Facultad de Ciencias, un ordenador IBM 1620, que constituyó la base del primer Centro de Cálculo de la Universidad de Valencia, del que fui su Director. Creo que fue el primer ordenador que funcionó en una Universidad española. En torno a este ordenador se congregó una pléyade de quimicofísicos, físicos teóricos e ingenieros, que hoy destacan en la investigación española.

Es habitual en un acto de esta índole, que el investido haga referencia explícita a sus investigaciones. Yo quiero ser fiel a esta norma, pero lo haré más adelante. Aquí me limitaré a enumerar las principales líneas de investigación desarrolladas:

- Homo y heteronúcleos conjugados
- Estudio teórico de la reacción Diels-Alder
- Relación estructura electrónica-actividad cancerígena

Estas investigaciones fueron subvencionadas por la Junta Provincial del Cáncer de Valencia. El discurso de Apertura del Curso 1955-56, que pronuncié yo, versó sobre este tema.

- Bioquímica cuántica
- Farmacología cuántica

Los resultados de estas investigaciones fueron objeto de numerosas publicaciones en revistas nacionales y extranjeras.

Dejé Valencia con hondo sentimiento, tras veintiséis años de dura lucha e ilusiones convertidas en realidad, pero con el convencimiento de que el Departamento de Química Física quedaba en manos expertas, con base sólida y con la seguridad plena de que su porvenir estaba asegurado. Mis vaticinios se confirmaron totalmente.

El año 1971 tuvo una gran importancia en mi vida académica y científica: mi traslado a la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) y la celebración en Granada del Congreso constituyente del Grupo de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Voy a referirme brevemente a ambos acontecimientos.

Desde 1970, el Profesor Juan Sancho, Decano de la Facultad de Ciencias de la UAM, venía hablándome de la posibilidad de mi traslado a dicha Universidad, con objeto de crear una Sección de Química Cuántica dentro del Departamento de Química.

Se trataba de una oferta muy tentadora y atractiva, pues me daba plena libertad a la hora de elaborar el plan de estudios, de seleccionar las líneas de investigación y de escoger a mis colaboradores. En estas condiciones, acepté su propuesta y el traslado se hizo efectivo a partir del mes de octubre de 1971.

En septiembre de aquel año, organizado por mí, se celebró en Granada el que después sería conocido como III Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, en el que se unificaron dos grupos de químicos cuánticos, uno franco-español y otro franco-italiano. El éxito del Congreso fue determinante a la hora de crear el Grupo de Químicos Teóricos de Expresión Latina, importante grupo científico regional europeo que se rige por una "regla de oro" (frase de Daudel): el uso en sus reuniones de todas las lenguas de origen latino. El último congreso, el décimo séptimo, tuvo lugar recientemente en Peñíscola (septiembre de 1987). Por la vitalidad e importancia de sus reuniones, el Grupo Latino ha contribuido grandemente al desarrollo de la Química Cuántica.

PERÍODO DE LA UAM (1971- _____)

Mi primera tarea al incorporarme al Departamento de Química de la UAM, fue organizar un grupo especializado, cuyo núcleo esencial lo constituyeron diez de mis colaboradores valencianos. Eran unos jóvenes brillantes, bien preparados, con ilusión y con ambición, que estaban realizando sus trabajos de Licenciatura o de Tesis doctoral.

Las líneas de investigación iniciales fueron, casi en su totalidad, las mismas en que veníamos trabajando; naturalmente, con el curso del tiempo, se desarrollaron otras nuevas.

No me resulta nada fácil, dada mi especialidad, elegir algunos de los temas para exponer ante Vds. -siquiera sea someramente- que resulten atractivos y asequibles a una asistencia heterogénea como esta. Escogí dos: el primero, iniciado aquí en Valencia; el segundo, en Madrid.

Transferencia protónica a través de un enlace de hidrógeno intramolecular

Todo comenzó (1970) con la realización de una Tesis doctoral en una de nuestras líneas de investigación más trabajada: relación entre la estructura electrónica de un compuesto y su actividad farmacológica; en este caso concreto, de las propiedades anti-reumáticas de los salicilatos.

Desde finales del siglo pasado era conocido el uso del ácido salicílico (el o-hidroxibenzoico) en el tratamiento de los procesos reumáticos. Posteriores investigaciones, demostraron que sus isómeros 3- y 4- hidroxibenzoicos eran inactivos.

Un estudio muy amplio sobre tres monohidroxi, cinco dihidroxi y dos trihidroxibenzoicos, demostró que sólo aquellos que eran o-hidroxi mostraban actividad antirreumática. Estos o-hidroxicompuestos presentaban una característica estructural muy importante: la formación de enlaces de hidrógeno intramoleculares.

Esta propiedad estructural atrajo de inmediato nuestra atención, y el estudio teórico se centró en el análisis de este tipo de enlaces. Ante los resultados sorprendentemente buenos obtenidos, abordamos el estudio teórico del modelo propuesto por Weller para explicar la doble fluorescencia que presenta el salicilato de metilo.

Asimismo, se estudiaron los estados excitados más bajos, llegándose a resultados muy interesantes, como el que la transición $1 [M, M^*]$ originaba una transferencia protónica al grupo carbonilo, siendo muy pequeña la barrera de esta transferencia. Todos estos resultados teóricos estaban plenamente de acuerdo con el modelo de Weller.

Por otra parte, en nuestras investigaciones obtuvimos una curva de transferencia protónica que presentaba la característica de un doble mínimo, siendo muy pequeña la barrera entre ambos. Esto motivó que, años después, dos investigadores americanos realizaran un experimento muy interesante, consistente en atrapar el salicilato de metilo en una matriz de Neón a 4.2 K. Como no fueron capaces de detectar la componente no transferida (~340 nm), concluyeron que la curva de transferencia protónica solo presenta un mínimo, contrariamente a nuestras predicciones teóricas. Así estaban las cosas, cuando otros investigadores americanos, en 1983, utilizando la técnica "Free-jet", volvieron a poner en tela de juicio que la curva de transferencia protónica tuviera un solo mínimo, contradiciendo los resultados experimentales anteriores.

Todavía más recientemente (1985), investigaciones realizadas en nuestro Departamento con el 5-clorosalicilato de metilo, han mostrado la presencia de una doble fluorescencia debida a una única estructura fundamental, lo que viene a confirmar el primitivo modelo de Weller.

Entre los resultados que se obtuvieron al comienzo de nuestras investigaciones, encontramos que el segundo singlete excitado no daba transferencia protónica; sin embargo, este hallazgo importante no fue jamás publicado. Rencientísimamente (enero de este año), un japonés, utilizando la espectroscopia "Free-jet", confirmó este hecho.

Quisiera terminar la exposición de esta investigación haciendo un breve comentario. Comenzó como Tesis doctoral, tratando de encontrar una relación entre la estructura electrónica de los hidroxibenzoicos y su actividad farmacológica; si bien es verdad que se llegaron a ciertas relaciones de este tipo, pronto, la atención inicial se desvió hacia un problema muy importante de la química estructural: la naturaleza del enlace de hidrógeno intramolecular, cuyo conocimiento es de primera importancia a la hora de interpretar muchos fenómenos químicos, bioquímicos y farmacológicos. Se trata de un problema abierto, que todavía espera su última interpretación.

Esto me recuerda una frase del Profesor Hirschfelder que decía: "Como el 90% de todos los científicos académicos, yo todavía trabajo sobre problemas presentes en mi tesis doctoral". Cuando la pronunció, habían transcurrido cuarenta años. Para nuestro antiguo doctorando, sólo dieciocho.

Un nuevo enfoque SCF no convencional

La otra investigación de la que voy a hablar brevemente pertenece al dominio de la Metodología químico-cuántica. Presenta una doble vertiente: de un lado, el empleo de una terminología conceptual manejada dentro de los esquemas de algoritmos matemáticos de lo más variado; de otro, el soporte informático más desarrollado.

Desde principios de siglo se tenía la idea; muy difusa, de que la complejidad de los fenómenos químicos era consecuencia de las diversas formas de unión de los átomos. La formulación por Lewis, en 1916, de la primera teoría electrónica, basada en el concepto fundamental del par electrónico compartido, proporcionó, por primera vez, un instrumento eficaz para el estudio de la química estructural. Como la teoría estaba profundamente enraizada en el empirismo químico, caló muy hondo en el espíritu de los químicos, hasta el punto de que en nuestros días constituye la base de su discursar. A pesar de los éxitos alcanzados aplicando esta teoría, sin embargo fue incapaz de explicar otros muchos hechos., entre ellos el comportamiento dinámico de los electrones.

La Mecánica ondulatoria proporcionó el marco adecuado para establecer la base conceptual y realizar el desarrollo de una teoría coherente de la valencia. Pauling demostró que, cuando se aplica el método de London al estudio de moléculas sencillas, los resultados eran totalmente equivalentes a los de Lewis; asimismo, dio un fundamento mecano-ondulatorio a la idea básica de Lewis sobre el par electrónico compartido por dos átomos. En resumen, la "teoría del enlace de valencia" de Pauling, que asocia las estructuras de Lewis con los componentes de la función de onda, fue la primera teoría cuántica de la valencia. Su aplicación práctica, no obstante, presentaba una gran complejidad de cálculo (a no ser que se hicieran simplificaciones, muchas de ellas difíciles de justificar) y tropezaba con graves dificultades conceptuales. Por todo ello, esta teoría ha caído, de hecho, en desuso.

La otra gran teoría, la de los orbitales moleculares, desarrollada por Mulliken y su escuela de Chicago a finales de la década de los cuarenta, es la base actual de la Metodología de la Química Cuántica. Desde el punto de vista práctico, es casi la única que se utiliza para calcular las estructuras electrónicas de las moléculas. Ello se debe, esencialmente, a su aportación de nuevas ideas y a su rigor conceptual y formal.

Ahora bien, este formidable instrumento teórico, con sus conceptos y terminologías propias, es poco asequible a los químicos de laboratorio, quienes están acostumbrados a expresar sus resultados mediante conceptos y relaciones de naturaleza empírica, lo que ha conducido a un distanciamiento muy perjudicial entre teóricos y experimentales.

Con el fin de superar esta situación y establecer un puente entre ambos grupos, en nuestro departamento se viene trabajando, desde hace varios años, en un ambicioso programa, en el que se definen de forma precisa, en el marco del formalismo mecanocuántico más riguroso, los conceptos intuitivos más útiles, tales como los de valencia, enlace, grupo funcional, etc. Este nuevo enfoque se apoya en dos ideas básicas, a saber: descripción electrostática de las interacciones electrónicas y la distinción entre términos de corto y largo alcance. Más, antes de entrar en su detalle, conviene que centremos la cuestión.

El método Hartre-Fock (HF), especialmente en su modalidad LCAO-SCF, es una de las herramientas más empleadas en el cálculo de la estructura electrónica de las moléculas. Cuando se opera con sistemas de tamaño pequeño y mediano, su aplicación tiene carácter rutinario.

La situación es completamente diferente si se trabaja con moléculas grandes (que, a veces, son de gran interés para el químico y ya no digamos en los campos de la bioquímica, biofísica y farmacología). En efecto, en cada uno de los ciclos del correspondiente proceso iterativo, es necesario construir la matriz de Fock, lo que requiere evaluar un número enorme (millones) de integrales bielectrónicas, cantidades que es menester almacenar para su posterior empleo. Si tenemos en cuenta que el número de integrales a calcular es del orden de $\sim m^4/8$ (donde m es el número de funciones de base empleadas), el problema puede ser formidable. De hecho, se trata de un auténtico cuello de botella.

Vemos, pues, que el punto débil inherente a todas las aproximaciones SCF convencionales reside en el empleo de las integrales bielectrónicas, las cuales, recordémoslo, no tienen relación directa con las magnitudes utilizadas para describir los fenómenos químicos, y que, por otra parte, no son esenciales -como veremos- para explicar las interacciones bielectrónicas.

Sería salirse del marco magnífico en que hago esta disertación, si expusiera con todo detalle los fundamentos de esta nueva aproximación SCF no convencional, por lo que sólo haré unas breves consideraciones sobre la misma.

El nuevo enfoque tiene su origen en el papel básico jugado por el llamado "potencial matricial de Fock", cuyos términos son de fácil interpretación física: corresponden a los potenciales electrostáticos clásicos, que dependen de la estructura electrónica particular del sistema. La matriz contiene dos tipos de distribuciones de carga: monocéntricas (sobre el mismo centro o atómicas) y bicéntricas (sobre dos centros o de enlace). (Esta distinción tiene su importancia técnica) Así, pues, el potencial de Fock describe la totalidad de las interacciones electrónicas en la aproximación SCF. Esto es lo que, en un principio, llamamos descripción electrostática de las interacciones electrónicas.

Cuando la teoría SCF se formula basándose en la interpretación anterior, surge, de forma natural, -tras analizar el comportamiento asintótico de los potenciales electrónicos- la segunda idea básica del nuevo enfoque: la separación entre las interacciones de corto y largo alcance. Las primeras, se pueden caracterizar mediante funciones localizadas, es decir funciones que tienden rápidamente a cero; las segundas, puede hacerse de una forma sencilla, en cuya descripción no voy a entrar.

Esta nueva metodología se viene utilizando intensivamente y los resultados obtenidos hasta ahora confirman nuestras esperanzas.

Para finalizar, quiero dedicar un afectuoso recuerdo a mis antiguos compañeros -con los que siempre mantuve unas relaciones cordiales- y de forma muy especial a dos Profesores de Medicina que, desgraciadamente, ya no están entre nosotros: José García-Blanco y Rafael Bartual Vicens, con los que mantuve lazos de profunda amistad.

No voy a recordar aquí sus cualidades y sus méritos como Maestros de la Escuela Valenciana de Medicina, sólo quiero referirme a su calidad humana. ¡Qué contraste más hermoso ofrecían sus poderosas y atractivas personalidades! Uno, con su fina ironía, y el otro, con su pujante vitalidad, presidieron, durante muchos años, lo que conocíamos como "el café de Fisiología". En torno a unas viejas tazas de café, nos reuníamos un grupo de profesores universitarios -desgraciadamente, del grupo inicial sólo quedamos Viña Giner, Anton Vilanova y yo mismo- y, con frecuencia, personas extrauniversitarias- todos de muy diversa ideología, en el Laboratorio de Fisiología al final de la mañana. El respeto mutuo fue su "regla de oro", la conversación era cordial y animada, y cualquier cuestión, por espinosa o polémica que fuera, tenía cabida en aquel rincón al que acudíamos a solazarnos una vez finalizada nuestra tarea universitaria. En ciertas ocasiones, encontrándome en situación apurada, solicité de ambos el consejo aleccionador y sus respuestas fueron siempre acertadas, suaves en la forma y firmes en el fondo. Recordaba hace años en un artículo periodístico el finado Profesor Tierno Galván, el papel importante que, en la vida universitaria española de décadas pasadas, jugaron los Profesores de talante liberal. Los doctores García-Blanco y Bartual Vicens fueron dos ejemplos genuinos de este comportamiento. Para los dos mi recuerdo inolvidable.