

Albert Fert irakaslea eta Manuel Yáñez irakaslea

Euskal Herriko Unibertsitateko honoris causa doktore
izendatzeko ekitaldia



Acto solemne de investidura como doctores Honoris Causa
por la Universidad del País Vasco del

**Profesor Albert Fert y del
Profesor Manuel Yáñez**

eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

Aurkibidea | Índice

Albert Fert irakaslea eta Manuel Yáñez irakaslea Euskal Herriko Unibertsitateko honoris causa doktore izendatzeko ekitaldia Acto solemne de investidura como doctores Honoris Causa por la Universidad del País Vasco del Profesor Albert Fert y del Profesor Manuel Yáñez	5
Albert Fert jauna eta Manuel Yáñez jauna irakasleak honoris causa doktore izendatzeko proposamenaren aktaren irakurketa, Pedro Iriondo idazkari nagusi jaunaren eskutik Lectura del Acta de Propuesta de Nombramiento de Doctor Honoris Causa a favor de los profesores Don Albert Fert y Don Manuel Yáñez por el Secretario General Pedro Iriondo	11
Albert Fert doktoregaiaren laudatioa, Julián González irakasle jaunaren eskutik Laudatio del doctorando Albert Fert por el profesor Julián González	15
Manuel Yáñez doktoregaiaren laudatioa, Jesús M.^a Ugalde irakasle jaunaren eskutik Laudatio del doctorando Manuel Yáñez por el profesor Jesús M.^a Ugalde	23
Albert Fert irakasle jaunaren hitzaldia UPV/EHUko Klaustroan sartzeko Discurso de ingreso en el Claustro de la UPV/EHU a cargo del profesor Albert Fert	43
Manuel Yáñez irakasle jaunaren hitzaldia UPV/EHUko Klaustroan sartzeko Discurso de ingreso en el Claustro de la UPV/EHU a cargo del profesor Manuel Yáñez	47
Hezkuntza sailburu Cristina Uriarte andrearen mintzaldia Intervención de la Consejera de Educación, Cristina Uriarte	65
Unibertsitateko errektore Nekane Balluerka andrearen mintzaldia. Intervención de la Rectora Magnífica de la Universidad, Nekane Balluerka	71

eman ta zabal zazu



Albert Fert irakaslea eta **Manuel Yáñez**
irakaslea Euskal Herriko Unibertsitateko
honoris causa doktore izendatzeko ekitaldia

Acto solemne de investidura como doctores
Honoris Causa por la Universidad del País
Vasco del Profesor **Albert Fert** y del Profesor
Manuel Yáñez

eman ta zabal zazu



Universidad del País Vasco Euskal Herriko Unibertsitatea









Albert Fert jauna eta **Manuel Yáñez** jauna irakasleak honoris causa doktore izendatzeko proposamenaren aktaren irakurketa, **Pedro Iriondo** idazkari nagusi jaunaren eskutik

Lectura del Acta de Propuesta de Nombramiento de Doctor Honoris Causa a favor de los profesores Don **Albert Fert** y Don **Manuel Yáñez** por el Secretario General **Pedro Iriondo**





El Consejo de Gobierno de la Universidad del País Vasco, en sesión celebrada el 6 de abril de 2017, procedió al nombramiento de D. Albert Fert y D. Manuel Yañez Montero como Doctores Honoris Causa por esta Universidad.

Albert Fert izendapena, Julian María Gonzalez Estevez dok. jn. Fisika Aplikatutako katedraduna aitabitxi izan duena, Kimika Zientzien Fakultateak proposatuta egin da, eta aparteko ikerketa lana kudeaketa zientifikoko lan berdingabearekin uztartzeko erakutsi duen gaitasunagatik eman zaio.

El profesor Albert Fert fue laureado con el Premio Nobel de Física 2007 por el descubrimiento del Efecto de Magnetorresistencia Gigante (GMR) que provocó la revolución en los dispositivos asociados al registro magnético. Se debe de resaltar que el primer artículo científico que publicó sobre GMR («Giant Magnetoresistance of (001) Fe/ (001)Cr Magnetic Superlattices») publicado en *Physical Review Letters* tiene actualmente más de 6.000 citas. Además, el descubrimiento de dicho efecto supuso el nacimiento de una de las nanociencias que suscita un máximo de interés para la comunidad científica como es la Spintrónica.

Albert Fert Doktoreak UPV/EHUko komunitate zientifikoarekin lankidetzan dihardu 2007a baino lehenagotik. Aipatutako lankidetzaren ondorioz, ikertaldeko kideek edo doktoregoko ikasleek bisita edo egonaldiak egiten dituzte Paris-Sud Unibertsitatearen nanomagnetismoaren eta spintronikaren arloko ikerketari buruzko gai zehatzak eztabaidatzeko.

El nombramiento de D. Manuel Yañez Montero, apadrinado por el Catedrático de Química-Física, Dr. D. Jesus Ugalde Uribe-Etxebarria, se ha realizado por iniciativa también de la Facultad de Ciencias Químicas y se otorga en reconocimiento de su excelente trayectoria académica e investigadora.

Yañez irakaslearen jarduera akademikoak kimika fisikaren eta kimika orokorraren alor guztia hartzen du, eta, batez ere, aipatzekoa da Kimika Teorikoaren eta Konputazionalaren unibertsitate arteko doktoregoaren sortzaileetakoa izan zela. 1999an ezarritako ikasketa horiek

Kalitate Aipamena lortu zuten, eta estatuko 20 unibertsitate bildu zitu-
tuen.

El profesor Yañez es editor de una de las revistas más prestigiosas del área de la química teórica y computacional, *Computational and Theoretical Chemistry*, lo que pone de manifiesto su destacada visibilidad en la comunidad internacional. Tan es así, que la American Chemical Society ha decidido editar un número especial (Festschrift issue) del *Journal of Physical Chemistry* dedicado a realzar los logros científicos de la fecunda carrera científica del profesor Yañez.

Yañez irakasleak «Theoretical Chemistry and Computational Modeling» masterra ekarri zuen Universidad del País Vasco / Euskal Herriko Unibertsitatera eta izenburu bereko doktorego programa dago horren osagarri; ikasketa horiek «Innovative Training Network (ITN)» European Joint Doctorate on TCCM (ITN-EJD-TCCM) aipamena lortu dute Europako Elkartean. Doktorego horrek Hezkuntza Ministerioaren Bikaintasun aipamena dauka, UPV/EHUko eta Europako ikasle eta ikertzaileen arteko lankidetzeta eta komunikaziorako bide da.

Estos merecimientos de los profesores Albert Fert y Manuel Yañez Montero llevaron al Consejo de Gobierno de esta Universidad a concederles su máxima distinción académica, nombrándoles Doctores Honoris Causa, de lo que, en mi condición de Secretario General de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, doy fe en Donostia, a 27 de octubre de 2017.



Albert Fert doktoregaiaren laudatioa,
Julián González irakasle jaunaren eskutik

Laudatio del doctorando **Albert Fert** por el
profesor Julián González





Euskal Herriko Unibertsitateko errektore andrea,
Hezkuntza sailburu andrea,
Vicerrector del Campus de Gipuzkoa de la UPV/EHU,
Secretario General de la UPV/EHU,
Decana de la Facultad de Ciencias Químicas,
Director de la Escuela de Ingeniería de Gipuzkoa,
Director del Departamento de Física de Materiales,
klastroko doktoreak,
jaun-andreok,
lankide eta lagun guztiok.
Egun on, Buenos días, Good morning, Bonjour.

Queridos Prof. Albert Fert y Marie, Prof. Manuel Yáñez y esposa, Prof. Jesús M.^a Ugalde, distinguidas autoridades, estimadas(os) compañeras y compañeros; amigas y amigos, alumnas y alumnos, dear colleagues and friends.

La Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, a través de la Rectora, me ha designado para ser el padrino de la graduación a Doctor Honoris Causa por nuestra Universidad del Profesor Albert Fert. Si actuar de padrino en este tipo de graduación es todo un honor, en la que hoy tiene lugar debe considerarse que tal honor si cabe es más significativo. Por ello, en primer lugar debo decir que me siento profundamente honrado y considero un privilegio ser el padrino de este acto y pronunciar la laudatio del Profesor Albert Fert.

Tradicionalmente durante mi intervención debería exponer sus méritos y justificar ante esta asamblea la propuesta que realizó el departamento de Física de Materiales para su nombramiento como Doctor Honoris Causa. Propuesta avalada por la Junta de Centro de la Facultad de Química y por el Consejo de Gobierno de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, recogida en sendos acuerdos aprobados todos ellos por unanimidad. Permitaseme expresar al Consejo de Gobierno el agradecimiento del Departamento de Física de Materiales y Facultad de Química, promotores de la propuesta.

Glosar la trayectoria del Profesor Albert Fert que justifique su investidura como Doctor Honoris Causa de la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea es, sin duda, tarea fácil atendiendo al dicho «lo bueno si breve dos veces bueno». En efecto, el trabajo pionero del Profesor Albert Fert sobre magnetorresistencia gigante abrió el campo de la espintrónica, por lo que fue laureado en 2007 con el Premio Nobel de Física junto con el Profesor Peter Grünberg al que desde aquí le envío mi más cariñoso salu-

do. Considero que una persona que obtiene el Premio Nobel ha logrado la excelencia y, por lo tanto, poco hay que decir para justificar sus méritos y trayectoria científica.

La Academia de Ciencias de Suecia concedió el Premio Nobel de Física 2007 a los Profesores Fert y Grünberg por descubrir, tal como acabo de mencionar, el efecto de Magnetorresistencia Gigante (GMR) que supuso una auténtica revolución, diría no solo científico-técnica, sino también social, con la aparición de los actuales dispositivos de almacenamiento digital (DVD, CD-ROM,...) dejando en un segundo plano a los sistemas de cintas (cassettes, video-tapes,...). El Profesor Mario Baibich, primer autor firmante del artículo «Giant Magnetoresistance of (OO)Fe/(OO)Cr Magnetic Superlattices» publicado en la prestigiosa revista Physical Review Letters, Vol 61(1988) p. 2472, que es, sin duda, el primer artículo del Prof. Fert sobre el efecto GMR, indicaba en una entrevista para un periódico local «La GMR estaba en nuestros hogares antes de haber transcurrido diez años desde su descubrimiento». Quiero destacar el hecho de que este y otros



trabajos del Prof. Fert han inspirado a algunos de los investigadores y las investigadoras de esta universidad e institutos de nuestro entorno en sus trabajos de nanomagnetismo, superredes, fases magnéticas topológicas como válvulas de espín, vortices, skyrmiones, etc. El Prof. Fert es pues un científico de referencia en el desarrollo actual de la nanoelectrónica y nanomagnetismo.

Tengo también que mencionar las cualidades humanas del Prof. Fert. Es una persona amigable y dispuesta siempre a ayudar sin buscar ningún protagonismo ni recompensa. Ha participado, con ese espíritu, en múltiples conferencias en Euskadi, congresos de alto impacto (Passion for knowledge en Donostia-San Sebastián), de especialidad (RNSTA 1 y 2 en Ordizia, DICNMA y Sol-SkyMag en Donostia-San Sebastián), mesas redondas de divulgación científica para el público en general en Donostia-San Sebastián, encuentros con el alumnos que van a iniciar sus estudios en la universidad para motivarles y entusiasmarles por la Ciencia y el Conocimiento (Ordizia y San Sebastián,...).

Para finalizar esta laudatio, deseo indicar que el paso del Profesor Fert por nuestra universidad puede decirse que es una referencia para el personal investigador de la Facultad de Química y Escuela de Ingeniería de Gipuzkoa, Donostia International Physics Center, CIC Nanogune, BCMaterials, referencia que ha animado siempre a alcanzar cotas más altas, estableciendo sólidos lazos de colaboración que han facilitado el nivel de competitividad alcanzado. Ello se debe, obviamente, a que Albert es, sin duda, uno de los miembros más destacados de la comunidad científica internacional, que ha sabido liderar el avance y la expansión de la Física en general, y del nanomagnetismo en particular, y apoyar a grupos prestigiosos de investigación cuyas investigaciones son acogidas y seguidas con gran interés por la comunidad científica internacional.

Antes de finalizar mi intervención, deseo expresar mi gratitud a los apoyos recibidos por parte del Profesor Pedro Miguel Etxenike (DIPC-UPV/EHU) su apoyo va más allá de un muy apreciado escrito para avalar la candidatura, Profesor José Manuel Barandiarán (BCMaterials, UPV/EHU), Profesor Antonio Hernando (Universidad Complutense de Madrid, Doctor Honoris Causa de la UPV/EHU), Profesor José Adolfo de Azcárraga (Director de la Real Sociedad Española de Física), Profesor Manuel Vázquez (Presidente del Institute of Electrical and Electronics Engineers de USA), Profesor Fernando Bartolomé y Victorino Franco (Presidente y Secretario del Club Español de Magnetismo, respectivamente), diferentes Departamentos de Física de la UPV/EHU y Ayuntamiento de Ordizia. No puedo olvidarme agradecer la presencia de miembros de la Cofradía del queso de Idiazabal de Ordizia de la que Albert y nuestra querida rectora son cofrades de honor, que, aunque escapa al dogmatismo académico universitario, personalmente les



agradezco su apoyo que siempre han mostrado hacia mis propuestas relacionadas con las actividades científicas de nuestro grupo de investigación. Agradecer la aportación de la Fundación Museo Jorge Oteiza aportando ese «granito de arena», pero importante a este acto. La presencia de parte de la corporación municipal y ciudadanos de Ordiza. Profesores venidos expresamente al acto de la universidades Castilla-La Mancha, Complutense de Madrid, Zaragoza, Navarra, Pública de Navarra, Cantabria, Oviedo, Santiago de Compostela y, por supuesto nuestra universidad. Agradezco la presencia de miembros de nuestro grupo Paula, Lorena, Rubén, Ai Ping, Kostyantyn, Mihail, Juan Mari y Lourdes por sus consejos en la redacción de esta laudatio. Y también agradecer la presencia de todas y todos vosotros presentes en este acto.

En consecuencia, a la vista de lo expuesto, por sus extraordinarias aportaciones científicas, destacando sin duda, el descubrimiento del efecto de Magnetoterristancia Gigante, su excelencia académica, colaboraciones científicas con investigadores y grupos de nuestra universidad, participar en numerosos eventos en Euskadi, y su categoría humana, el Prof. Fert posee méritos suficientes para avalar su nombramiento como Doctor Honoris Causa de nuestra universidad. Si en general, es un gran honor para el doctorando ser distinguido como Doctor Honoris Causa, quizás es un mayor honor para la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea acoger al Profesor Albert Fert en su claustro de doctores.



Y por todo lo expuesto, solicito se proceda a investir al profesor Albert Fert Doctor Honoris Causa por la Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea.

Eskerrik asko. Muchas gracias. Merci beaucoup. Thank you very much for your attention.



Manuel Yáñez doktoregaiaren laudatioa,
Jesús M.^a Ugalde irakasle jaunaren eskutik.

Laudatio del doctorando **Manuel Yáñez** por el
profesor **Jesús M.^a Ugalde**





«Uno de los poetas, de cuyo nombre no me acuerdo, tiene un pasaje, el cual soy incapaz de recordar, en uno de sus poemas, que ahora mismo se ha escapado de la memoria, que casa admirablemente con esta ceremonia». Así comienza Sir Pelham G. Wodehouse uno de sus magníficos relatos de uno de sus celebrados libros de relatos¹. Tampoco yo me acuerdo de todos los hechos acaecidos al Prof. Manuel Yáñez, pero me esforzaré en contarles su historia, que si la acierto a contar, verán que es una historia ejemplar.

Manuel Yáñez nació en Lugo y allí estudió y pasó su adolescencia, no fue idílica, se lo aseguro. Pero el Yáñez adolescente tenía metas notables que alcanzar lejos de Lugo. Estudió Química en Santiago de Compostela y después de una corta estancia como maestro en la Universidad Laboral de Cheste (Valencia), presentó su Tesis en la Universidad Autónoma de Madrid en 1973. Sería Premio Extraordinario de Doctorado. Los dos años siguientes los pasa en la Universidad Carnegie Melon de Pittsburgh, Pennsylvania, en el grupo del Prof. John A. Pople, premio Nobel de Química en el 1998. Allí conoce y se hace conocer en la *crème-de-la-crème* de la Química Computacional y probablemente allí, -no lo se a ciencia cierta, ya se lo advertí nada mas empezar- surgió su pasión, y no exagero, por la investigación científica, donde ha logrado alcanzar las más altas cotas de excelencia. Ha sido premiado en numerosas ocasiones, por la Fundación de la Universidad Autónoma de Madrid en 1993, en el 2001 por la Real Sociedad Española de Química y en el 2003 el Gobierno Francés le otorgó el Premio de Investigación Betancourt-Perroquet. Tiene la Orden Civil de Alfonso X el Sabio, con categoría de Cruz. La comunidad científica también ha reconocido su valía, es Editor del *Computational and Theoretical Chemistry* y es miembro de los Consejos Editoriales del *Mass Spectrometry Reviews* y del *Open Journal of Chemical Physics*. Ha sido el Editor General de los *Anales de Química*, desde 2009 al 2012, para más señas. Asimismo es eva-

1 «One of the poets, whose name I cannot recall, has a passage, which I am unable to remember, in one of his works, which for the time being has slipped my mind, which hits off admirably this ceremony». P. G. Wodehouse. (1996). «*The Golf Omnibus*». (p. 106). New York: Wings Books.

luador externo de las fundaciones de Ciencia de Bélgica, Canadá, Austria, Chile y Australia y es miembro electo del Consejo de la World Association of Theoretical and Computational Chemists. Es el único químico computacional español invitado a contribuir a la *Encyclopedia of Computational Chemistry*. Honor que comparto, yo, eso sí, en la categoría de único químico computacional vasco. Ha sido Profesor visitante en la Universidad d'Evry en París, de Rennes en Bretaña, en la Pontificia Universidad Católica



de Chile, en la Dalhousie University en Halifax, Canadá, donde yo hice mi tesis Doctoral y en la Universidad de Nueva Gales del Sur en Sydney. Tal es su dedicación al trabajo docente que yo conocí más de Sydney en una semana que él en los seis meses que estuvo allí de Profesor. Tuve que enseñarle algunas zonas de Sydney de las que él ni siquiera había oído hablar.

He oído decir muchas veces que Manuel Vázquez, es, sin lugar a dudas, el químico teórico computacional español que goza de mayor reconocimiento y prestigio internacional. Esta es una afirmación no exenta de riesgo ya que si bien podemos cuantificar exactamente cuantos tantos más gana Beñat

Rezusta, el gran pelotari de Bergara, respecto al siguiente mejor zaguero, decidir quien es el químico teórico computacional español más loado es, en gran parte, materia de gusto. Yo prefiero centrarme menos en la eminen- cia y más en su primo hermano menos glamuroso, el rigor. El rigor y la honestidad son las señas de identidad del Prof. Yáñez.

Permítanme que les ofrezca una breves pinceladas para enmarcar las con- tribuciones científicas del Prof. Yáñez en el ámbito de la Ciencia, que en palabras de C. P. Snow² «... *in its intellectual depth, complexity and articula- tion [science] is the most beautiful and wonderful collective work of the mind of man*». El Prof. Etxenike, con suficiente razón, puntualiza que de hecho es la obra *de arte* colectiva más bella de la humanidad.

Me corresponde poner en contexto el campo científico al cual el Prof. Yá- ñez ha contribuido, los detalles de qué y como lo ha hecho ya los dará él mismo. Trataré de hacerlo de manera que pueda ser apreciado por todos los miembros del claustro. Un claustro educado, pero no necesariamente especialista en todo. Mi esfuerzo está dirigido a que todos puedan adquirir bases lo suficientemente sólidas como para juzgar en su justa medida la magnitud del trabajo del Prof. Yáñez.

Comencemos por el principio, le dijo el Rey a Alicia, en el País de las ma- ravillas³, y al principio... no había nada, mejor dicho no sabemos a ciencia cierta que había, hasta que de pronto, a los 5.4×10^{-44} s después de que co- menzara el tiempo⁴, nos dimos cuenta de que ocurrió el *big bang* y a partir de aquí los hechos se precipitaron. No relataré toda la fascinante historia temprana del Universo, sólo señalaré que esto ocurrió hace 13.67×10^9 años y tuvieron que pasar 380.000 años para darse las condiciones que posibili- tan la existencia de los primeros núcleos, de hidrógeno, helio y trazas de litio y berilio. La gravedad hizo gran parte del resto. Hizo que los núcleos se agruparan formando estrellas y en estas se dieron las condiciones para la nucleosíntesis de todos los demás elementos hasta el hierro, el número 26 de la tabla periódica de 92 elementos naturales y una decena larga de otros creados en los reactores nucleares. La nucleosíntesis de los núcleos más allá que el hierro en la tabla periódica, exigía más energía y esta fue proporcio- nada por las explosiones de súper-nova que esparcieron una nube de nú- cleos atómicos, un gas de núcleos átomos, a lo largo y ancho del universo.

2 C. P. Snow. (1986). «*The Two Cultures and a Second Look*». (p. 14). New York: Cambridge University Press

3 «Begin at the beginning», the King said, very gravely, «and go on till you come to the end: then stop». L. Carroll. (1865). *Alice's Adventures in Wonderland*, London: Macmillan

4 5.4×10^{-44} s es el tiempo que tarda un fotón en recorrer la longitud de Planck, esto es: $l_p = (\hbar G/c^3)^{1/2}$, donde G es la constante de gravitación, \hbar la de Planck y c la velocidad de la luz en el vacío, y marca el periodo de incertidumbre al principio del Universo.

Así pues teníamos los núcleos y la temperatura lo suficientemente baja, unos 3000 K, como para que estos confinaran los electrones del plasma y formaran los átomos, todos los átomos del universo se sintetizaron de esta manera⁵. De nuevo la gravedad hizo que los átomos se agruparan y ahora ocurrió algo sorprendente, se creó complejidad. Una vez cercanos entre sí, los átomos reaccionaron y formaron moléculas que reaccionaban a su vez con los átomos y con las moléculas que se iban formando, generando un universo localmente más denso donde la fase gaseosa dio lugar a fases condensadas, y mucha más complejidad. Y nosotros para mitigar la complejidad «creamos» el entorno. Diferenciamos el objeto del entorno; el fenómeno, la reacción química, y el entorno donde esta tenía lugar, lo que había a su alrededor. La gravedad, las reacciones químicas y el tiempo actuaron tan eficazmente que lograron que la química en fase gaseosa casi, casi desapareciera. Casi todo ocurría en fase condensada donde las moléculas crearon una nueva química, la química supramolecular, al verse las unas a las otras en entornos complejos y cambiantes⁶.

Pero la especialidad del Prof. Yáñez no es la química supramolecular, es la química molecular en fase gaseosa. ¿Por qué querría alguien estudiar química molecular en fase gaseosa cuando tiene algo de nivel superior, como la química supramolecular? Hay buenas razones para ello. Las de orden práctico son estas:

- I La química molecular en fase gaseosa está ocurriendo todavía a gran escala en el universo, en las llamadas nubes interestelares. La nebulosa de la cabeza de caballo es el ejemplo canónico de una factoría molecular en fase gaseosa.
- II Las atmósferas planetarias están determinadas por la química molecular de sus gases. ¿Por qué es roja la gran mancha roja de Júpiter? es una pregunta fascinante. La respuesta es probable que también lo sea.
- III En atmósferas no tan remotas también se da, en la nuestra sin ir más lejos. El calentamiento global, el efecto invernadero de los gases atmosféricos, el agujero de ozono, etc. Todos ellos son fenómenos de química molecular en fase gaseosa..., que están proporcionando salarios substanciosos a muchos, no todos ellos químicos.
- IV Incluso más cerca. Los fullerenos, moléculas de carbono que se asemejan a balones de fútbol y que fueron sintetizados en fase gaseosa, por ablación de láminas de grafito mediante láser, constituyen una

5 D. Rehder. (2010). *Chemistry in Space*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

6 J.-M. Lehn. (2006). *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.

fascinante nueva variedad alotrópica del carbono. De hecho Sir Harold Kroto, Nobel de química en 1996 junto a Smalley y Curl, llamó al C60 «*the Celestial Sphere that Fell to Earth*»⁷.

- V Mucho más cerca. La química molecular (iónica) en fase gaseosa se emplea para estudiar eventos químicos, tales como reacciones químicas prototípicas de química orgánica, que se dan en fases condensa-



das con el objeto de entender sus propiedades intrínsecas, las que no dependen del entorno.

Observen que antes he llegado a la química supramolecular y ahora he terminado argumentando la importancia de la química en fase gaseosa. Esto es, reclamando el despojar de todo lo que de supramolecular tiene esta química para entenderla. Parece un contrasentido y sobre todo parece una reivindicación del reduccionismo científico.

7 H. Kroto .(1992). *C60: Buckminsterfullerene, The Celestial Sphere that Fell to Earth*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 31, 111-129

No es así y las contribuciones del Prof. Yáñez lo atestiguan. El que así lo parezca es más bien el resultado de un mecanismo atávico, profundamente enraizado en las ciencias naturales, esto es: el tratar de analizar, comprender y por tanto reducir la realidad material en términos de unas entidades fundamentales (stoicheia) que son indivisibles, eternas y cualitativamente inmutables. La idea que subyace aquí es: «*Todo, hasta lo más complejo, está constituido por agregaciones de estas entidades fundamentales, y por nada más. Así pues, lo que resta no puede ser más que fenómenos secundarios (epifenómenos) que acompañan al fenómeno principal sin efecto alguno sobre este y que son debidos a meras variaciones cuantitativas de las propiedades intrínsecas de las entidades fundamentales y como tal este resto debe ser directamente derivable de las citadas propiedades intrínsecas y las reglas de combinación de las entidades fundamentales*». Este es el paradigma mecanicista que en esencia descansa sobre la suposición de unas propiedades básicas fijas, las cuales nunca cambian cualitativamente, lo que significa, según Bohm⁸, que «*las propias leyes físicas podrían ser reducidas a meras relaciones cuantitativas*». De hecho, Feynman incide en este paradigma mecanicista cuando escribe al final de capítulo 19 de su libro tercero de lecciones de física⁹, «*La ecuación de Schrodinger ha sido uno de los grandes triunfos de la física. Estableciendo las bases de la maquinaria básica de la estructura atómica ha proporcionado una explicación para los espectros atómicos, para la química y para la naturaleza de la materia*», entusiásticamente asentido por algunos notables filósofos de la ciencia. Por ejemplo, Nagel escribió¹⁰: «*Muchas partes de la química del siglo XIX (y quizás la totalidad de esta ciencia) es reducible a la física posterior a 1925*».

Sin embargo, muchos físicos, y prácticamente todos los químicos, disienten de la idea de que toda la química, o incluso una explicación coherente de toda la naturaleza de la materia, esté incluida en la ecuación de Schrodinger, a pesar de la famosa encendida proclama de Dirac¹¹ en esa dirección. Las contribuciones científicas del Prof. Yáñez han ayudado a establecer firmemente que la química, la ciencia química, corresponde a un

8 D. Bohm. (1984). *Causality and Chance in Modern Physics*. London: Routledge.

9 «The Schrodinger equation has been one of great triumphs of physics. By providing the key to the underlying machinery of atomic structure it has given an explanation for atomic spectra, for chemistry and for the nature of matter». R. Feynman, R. Leighton, M. Sands. (1965). *The Feynman Lectures on Physics: Quantum Mechanics*. (p. 19-18). Reading MA: Addison-Wesley

10 «Certain parts of 19th century chemistry (and perhaps the whole of this science) is reducible to post-1925 physics». E. Nagel. (1961). *The Structure of Science*. (p.362). New York: Hartcourt, Brace & World

11 P.A.M. Dirac. (1929). *Quantum Mechanics of Many-Electron Systems*. (p. 714). Proc. Roy. Soc. London A123, 714-733



contexto que requiere de la generación de ideas y conceptos para describir propiedades que no están contenidas en el nivel de descripción de la mecánica cuántica. Esto es que la química no es reducible a la mecánica cuántica, es algo diferente, está a otro nivel. De la misma manera que la química no es en sí misma la explicación de la biología. Philip Ball¹² lo expresa mas elocuentemente: «*No creo posible que la mente humana pueda ser nunca explicada en términos moleculares, mucho mas allá de lo que "El Rey Lear" de William Shakespeare puede ser explicado por el alfabeto*».

La idea de que el mundo material está estructurado por entidades fundamentales independientes, sean moléculas u otra cosa, interaccionado entre sí se contradice con los principios de la mecánica cuántica¹³. En rigor, el mundo material es un «todo», un todo que no está constituido por partes con existencia independiente. Se puede decir que en los sistemas cuánticos no existen subsistemas separados. Un apunte: Desde un punto de vista operacional dos sistemas están separados entre sí, si y sólo si todo experimento hecho sobre uno de ellos no altera el estado del otro. En mecánica clásica, los estados individuales de los subsistemas de un sistema determinan el estado del sistema total. Esta propiedad se llama *separabilidad*. La mecánica clásica está matemáticamente estructurada para conservar la separabilidad. Por el contrario, los sistemas que no poseen esta propiedad se llaman *holísticos*. La mecánica cuántica es la primera teoría holística formalizada matemáticamente de la cual tenemos conocimiento.

La descripción científica de cualquier sistema consiste en especificar el estado y las propiedades asociadas a tal estado y después introducir la evolución de las propiedades mediante las ecuaciones dinámicas. Existen diferentes niveles de descripción de los sistemas. Hoy en día consideramos que la mecánica cuántica constituye el nivel inferior, el más fundamental. Otras teorías, tales como la termodinámica, la mecánica y electromagnetismo clásicos, por ejemplo, son consideradas como menos fundamentales, esto es: descripciones de nivel superior.

El decir que algo puede ser descrito en términos de partes elementales, por tanto, puede ser práctico, pero no es cierto en el nivel de descripción cuántico. Ahora bien, bajo las condiciones apropiadas, un sistema material (el «todo») sí que puede ser convenientemente descrito en términos de partes. Pero existe una gran variedad de descomposiciones no-isomórficas

12 «I don't think it likely that the human mind will ever be explained in molecular terms, any more that "King Lear" is explained by the alphabet». P. Ball. (2001). *Stories of the Invisible. A guided Tour of Molecules*. (p. 41). New York: Oxford University Press

13 G. Jaeger. (2014). *On the Identification of the Parts of Compound Quantum Objects*. Fund. Phys. 44, 709-724

del todo en partes. Tales descomposiciones no-isomórficas conducen a particiones diferentes, que reflejan perspectivas diferentes del todo.

Así pues en los sistemas cuánticos tenemos de forma natural una multitud de particiones no-equivalentes, derivadas de las diferentes posibles descomposiciones no-isomórficas del todo en partes, no solamente todas ellas admisibles, sino igualmente elegibles y necesarias. La elección de una de ellas no está dictada *a priori*, depende del contexto elegido, ya que las partes en sí son meras estructuras declaradas indescomponibles en el contexto en cuestión, sin significado ontológico. Sin embargo, esta distinción entre partes permite que estas puedan ser descritas mediante descripciones de nivel diferente (siempre y cuando se garantice la convergencia continua entre ellas). Tal es así, que la concurrencia de niveles de descripción diferentes, puede dar lugar a la *emergencia* de fenómenos y propiedades no contenibles en la descripción de nivel inferior, la más fundamental.

La emergencia es normalmente considerada como la antítesis de la agregatividad. Naturalmente que existen fenómenos de emergencia debidos a la organización, a la coordinación singular de las propiedades intrínsecas de las entidades fundamentales. Tal y como Mark Bedau expone convin-



centemente¹⁴, tales propiedades emergentes pueden ser denominadas como de *emergencia débil*. Jaegwon Kim las denomina *propiedades resultantes*¹⁵.

Sin embargo, tenemos otro tipo de emergencia, llamada *emergencia de contexto, o contextual*¹⁶, adoptada por los químicos a instancias de los trabajos de Hans Primas¹⁷. Este es el caso de la *estructura molecular*, el concepto central de la química molecular que no deriva de los primeros principios físicos y por tanto es exclusivamente debida al contexto. Es aquí donde debemos encuadrar el trabajo del Prof. Yáñez. Dada su centralidad, hablemos pues de la estructura molecular.

Toda la química molecular está basada en el concepto de la estructura molecular; esto es: la forma de las moléculas. Todo persona con una formación cultural mínima asignaría al benceno una estructura plana anular de simetría D_{6h} . Es parte de nuestro bagaje cultural. Pero el concepto de estructura molecular es algo más complejo. De hecho todas las moléculas con la misma fórmula empírica tienen la misma ecuación de Schrodinger, $\hat{H}\Psi = \hbar\partial_t\Psi$, (primeros principios), donde tanto el hamiltoniano, \hat{H} , como la función de onda, Ψ , dependen de las coordenadas de todos los electrones y de todos los núcleos. Esto es, los electrones y los núcleos están acoplados holísticamente a través de la función de onda y por tanto, a este nivel de descripción, de primeros principios cuánticos, la forma de la molécula no es una evidencia.

Históricamente el concepto de estructura molecular se ha introducido mediante la llamada aproximación de Born-Oppenheimer. Sin embargo tal denominación puede ser engañosa, porque el asunto esencial no es una aproximación, sino la rotura del acoplamiento entre los electrones y los núcleos que origina un cambio de paradigma científico, una nueva teoría. Esto se aprecia cuando se expande la función de onda, Ψ , en términos de $\mu = (m/M)^{1/2}$, siendo μ la relación entre las masas del electrón y el núcleo. En el límite $\mu \rightarrow 0$, de masa nuclear infinita, la serie no converge uniformemente. Esto significa que el comportamiento en el límite es fundamentalmente diferente del comportamiento a medida que se alcanza el límite. De hecho está probado (i) que $\mu \rightarrow 0$ corresponde a una singularidad de tal expansión, (ii) que en $\mu \rightarrow 0$ el acoplamiento entre electrones y núcleos

14 M. Bedau. (1997). *Weak emergence*. En J. Tomberlin (Ed.), *Philosophical Perspectives: Mind, Causation and World* (Vol. 1, pp.375-399). Malden, MA: Blackwell

15 J. Kim. (1999). Making Sense of Emergence. (p. 19-2). *Philo. Stud.* 95, 3-26

16 R. C. Bishop, H. Atmanspacher. (2006). *Contextual Emergence in the Description of Properties*. *Fund. Phys.* 36, 1753-1777

17 H. Primas. (1983). *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism*. (pp. 335-342). Berlin: Spinger.



se desvanece (iii) que las simetrías de rotación y de permutación de los núcleos en la función de onda, Ψ , se suprimen y (iv) que si los núcleos se describen clásicamente, entonces $\mu \rightarrow 0$ representa, en este nuevo contexto, la condición de estabilidad para la expansión asintótica de la función de onda, Ψ , en términos de la dinámica *cuántica* de los electrones en el campo eléctrico *clásico* de los núcleos. Por tanto, la llamada aproximación de Born-Oppenheimer reemplaza la descripción cuántica por una nueva descripción (semi-cuántica) generada por la regularización de la convergencia en el punto singular $\mu \rightarrow 0$. El que la relación entre dos teorías sea singular en el punto de contacto, el límite $\mu \rightarrow 0$, es una indicación de que no es posible ningún tipo de reducción entre esas teorías. En general, cuando las relaciones asintóticas entre teorías son singulares podemos esperar que en esa «tierra de nadie» aparezcan fenómenos nuevos para los cuales necesitemos nuevas teorías explicativas. Estos nuevos fenómenos son las llamadas propiedades emergentes.

La estructura molecular emerge en el contexto de la regularización de la expansión singular en $\mu \rightarrow 0$ y contiene variables clásicas no expresables en la teoría de la que emerge. Esto es, la regularización de la convergencia en $\mu \rightarrow 0$ conduce a un cambio del paradigma teórico donde la descripción rigurosa de la estructura molecular emerge en el nivel químico de descripción cuando al nivel físico se le ha impuesto una adecuada topología contextual, la determinada por el campo eléctrico clásico de los núcleos. Mucha de la habilidad científica reside en saber en cual de estos niveles de jerarquía estamos mirando, y por tanto discernir que es relevante y que no. El Prof. Yáñez ha sido un maestro en estas lides.

En términos matemáticos, la convergencia del límite $\mu \rightarrow 0$ se corresponde con el criterio de estabilidad que establece un entorno nuclear con respecto al cual la dinámica de los electrones puede ser convenientemente considerada separable, y por tanto establece las condiciones apropiadas para que el «todo» pueda ser convenientemente descrito en términos de partes, a saber, electrones y núcleos. Sin embargo, como el nivel de descripción cuántico es necesario para derivar la propiedad nivel superior (la estructura molecular), los principios cuánticos no pueden ser violados en ninguna descripción de nivel superior, la descripción del nivel superior deber ser compatible con las leyes del nivel inferior.

En términos físicos, las moléculas son objetos cuánticos asignados a la dinámica cuántica de los electrones en un contexto semi-cuántico establecido por las posiciones y cargas eléctricas clásicas de los núcleos atómicos que la componen.

En términos químicos, las moléculas son las menores unidades posibles de significado de la química. Las moléculas son como palabras, los átomos



son las letras. La mayoría de las palabras son agregados de varias letras dispuestas en un orden preciso. En las moléculas, al igual que en las palabras, el orden en el que se disponen sus componentes es fundamental, Honoris «Causa» y Honoris «Acusa» no significan lo mismo. Es a través de las moléculas, no de los átomos, que podemos contar historias en el mundo submicroscópico.

Es en este contexto donde las aportaciones del Prof. Yáñez han cobrado relevancia singular. Él ha sabido como pocos leer y contar historias fascinantes del mundo molecular submicroscópico relacionadas con la caracterización de la estructura molecular en términos de enlaces químicos y la predicción de la reactividad derivada de esta. En previsión de la conferencia del Prof. Yáñez, mencionaré, someramente, las que a mi me parece que son sus más importantes contribuciones a la química molecular.

Cabe destacar en primer lugar, la caracterización de nuevos enlaces químicos como los *beryllium bonds*¹⁸ (enlaces de berilio) ya forman parte del parque de nuevos enlaces químicos.

No menos impactantes han sido sus trabajos acerca de la química iónica en fase gas, ya que varios de ellos han puesto de manifiesto el papel fundamental que estructuras moleculares no-convencionales que ponen en cuestión conceptos del enlace químico que se creían bien asentados, juegan en la reactividad y la estabilidad de muchas especies iónicas en fase gas. Un ejemplo paradigmático es la primera descripción de un *carbono pentavalente*¹⁹ en complejos con enlaces C–Si, lo que motivaría la búsqueda de enlaces similares en complejos donde el Si se sustituye por Ge o Sn.

No menos sorprendente es la confirmación de la existencia de *sistemas moleculares planetarios* en los que el ión orbita alrededor de una base química²⁰, cual satélite alrededor de su planeta, hecho que sería encontrado con posterioridad por otros investigadores en otros sistemas²¹, o el des-

-
- 18 M. Yanez, P. Sanz, O. Mo, I. Akorta, J. Elguero. (2009). *Beryllium Bonds. Do they Exist?*. J. Chem. Theor. Comp. 5, 2763-2771
- 19 J. Z. Dávalos, R. Herrero, J. L. M. Abboud, O. Mó, and M. Yáñez. (2007). *How can a carbon atom be covalently bound to five ligands? The case of $Si_2(CH_3)_7^+$ or the beauty of symmetry*. Angew. Chem. Int. Ed. 46, 381
- 20 J. L. M. Abboud, I. Alkorta, J. Z. Dávalos, J. F. Gal, M. Herreros, P. C. Maria, O. Mó, M. T. Molina, R. Notario and M. Yáñez. (2000). *The $P_4 \cdots Li^+$ Ion in the Gas Phase: A Planetary System*. J. Am. Chem. Soc. 122, 4451
- 21 (i) A. Irigoras, J. M. Mercero, I. Silanes, J. M. Ugalde. (2001). *The Ferrocene-Lithium Cation Complex in the Gas Phase*, J. Am. Chem. Soc. 123, 5040-5043. (ii) A. H. Ilkhechi, J. M. Mercero, I. Silanes, M. Bolte, M. Scheibitz, H. W. Lerner, J. M. Ugalde, M. Wagner. (2005). *A Joint Experimental and Theoretical Study of Cation-p Interactions: Multiple-Decker Sandwich Complexes of Ferrocene with Alkali Metal Ions (Li^+ , Na^+ , K^+ , Rb^+ , Cs^+)*, J. Am. Chem. Soc. 127, 10656-10666.



cubrimiento de nuevos efectos como el *efecto escorpión*, bautizado así porque la cola alquímica de los alquilbencenos se pliega como la cola de un escorpión para interactuar con los iones metálicos, explicando así la sorprendente e inesperada basicidad de estas especies²².

El Prof. Yáñez ha sido el primero en cuantificar los efectos cooperativos en trímeros de agua incluyendo la correlación electrónica²³. Fundamentales fueron también sus contribuciones a la caracterización de clusters de metanol y de etanol²⁴, así como el primer análisis cuantitativo de las interacciones calcógeno-calcógeno como competidores de los enlaces de hidrógeno²⁵.

Otra de las características sobresalientes del trabajo del Prof. Yáñez, ha sido el proporcionar respuesta a cuestiones fundamentales de sus colegas experimentales, con los que ha colaborado asiduamente y aún lo sigue haciendo. Sus predicciones siempre han motivado a los experimentales. Valga citar aquí sus estudios acerca los procesos conocidos como *dissociative proton attachment*, que pueden ser observados cuando el centro básico que interactúa con el protón es un átomo de baja electronegatividad y los fragmentos derivados de la disociación son intrínsecamente estables²⁶.

Que el Prof. Yáñez continúe siendo buscado para colaborar con él, puede apreciarse de la relación de colaboradores citados en la lista de sus publicaciones. Esto es debido no sólo a su inusitada intuición para darse cuenta de cual es la manera más inteligible de resolver los problemas planteados, incluso en estadios tempranos, sino también a su humilde y afable personalidad. Ejerce su influencia de forma sutil, de manera que muchos no nos damos cuenta de cuanto nos ha influido. La serenidad de su personalidad se complementa con la de su mujer, la Prof. Otilia Mò, cuya mención es *sine qua non* para apreciar en su justa medida la del Prof. Yáñez. Hablar de Otilia es hablar de la persona sin la cual el impresionante trabajo que ha llevado al Prof. Yáñez a este Doctor Honoris Causa no hubiera tenido lugar.

-
- 22 O. Mò, M. Yáñez, J. F. Gal, P. C. Maria, M. Decouzon. (2003). *Enhanced Li+ Binding Energies in Alkylbenzene Derivatives: The Scorpion Effect*, Chem. Eur. J. 9, 4330-4338.
 - 23 O. Mò, M. Yáñez, J. Elguero. (1982). *Cooperative (nonpairwise) effects in water trimers: an ab initio molecular orbital study*. J. Chem. Phys. 97, 6628
 - 24 L. González, O. Mò, M. Yáñez. (1999). *Density functional theory study on ethanol dimers and cyclic ethanol trimers*. J. Chem. Phys. 111, 3855.
 - 25 P. Sanz, M. Yáñez, O. Mò. (2002). *The Role of Chalcogen-chalcogen interactions on the intrinsic basicity and acidity of β -chalcogenovinylaldehydes, $HC(=X)-CH=CH-CYH$ ($X=O, S; Y=Se, Te$)*. Chem. Eur. J. 8, 3999.
 - 26 O. Mò, M. Yáñez, J. F. Gal, P. C. Maria, J. C. Guillemin. (2002). *Vinyl- and ethynylsilanes, -germanes and -stannanes. A new case of dissociative proton attachments*. J. Phys. Org. Chem. 15, 509-513.





El grado de Doctor Honoris Causa es la expresión de la más alta estima por parte de la Universidad. Es algo que no se puede solicitar. Es concedido sólo a los pocos que la Universidad considera que tienen tal grado de excelencia que es de justicia otorgarles un honor especial. Este es uno de esos casos, ya que la excelencia junto al rigor y honestidad son las palabras que mejor caracterizan al Prof. Yáñez, en múltiples facetas, la docente, la investigadora y sobre todo la humana.

La historia que ahora termino de relatarles acerca del Prof. Yáñez contiene razones sobradas para que lo aceptemos en el claustro como Doctor Honoris Causa. Es para mi un privilegio pedirles que el máximo grado de nuestra Universidad le sea concedido hoy al Prof. Yáñez.









Albert Fert irakasle jaunaren hitzaldia
UPV/EHUko Klaustroan sartzeko

Discurso de ingreso en el Claustro de la UPV/EHU
a cargo del profesor **Albert Fert**



Madame le Recteur de l'Université du Pays Basque,
Mesdames et Messieurs représentant le Pays Basque et la ville de San-Sebastian-Donostia,
très chers collègues et amis de 'Université du Pays Basque, de Centre de Recherche du Pays Basque, d'autres Universités et Centres de Recherche d'Espagne:
Bonjour, Egun on, Buenos dias, Good morning.



I shift to English. I am very proud to become Doctor Honoris Causa of the University of the Basque Country, in this town of San Sebastian-Donostia I love, in the presence of some many colleagues and friends. I thanks the University of the Basque Country for giving me this privilege.

Of course, you know that having Prizes and Honoris Causa Awards is not the main objective and the supreme satisfaction of scientists like all of us. Science by itself, research by itself, is so fascinating that, even without awards, it is amazing and greatly satisfying to be a scientist. What is fascinating is opening new roads in the world of knowledge, transforming pure ideas into real experimental facts and, even more, into real applications, technological innovations, that are useful to many people. Moreover, we, researchers, we also like to share the beauty of science and the pleasure of our work with other people, scientists and non-scientists. And so, today, I want to explain a little more what amazes me in my job of physicist, what can be the pleasure of this exploration transforming, progressively, from surprise to surprise, pure abstractions into, finally, devices, computers, telephones that everybody uses. I will now describe some examples of this road in the ten minutes of slides I will present.

[10 minutes of slides]

To conclude, of course, we see today the emergence of new tracks for research that will lead to innovations in 10 or 20 years. Skyrmions, these strange balls of spins that can be as small as a few nanometers, can be moved at 100 meters per second by electrical currents and are promising for several types of applications. And, in another promising direction, there are also tests of new nanocomponents that can mimic the properties of

neurons and synapses in bio-inspired computers. Science is always going on, for me it is always a wonder, a wonder that I tried to share with you today. I thank you for your attention and I thank again the University of Basque Country for the Honoris Causa Doctorate.



Manuel Yáñez irakasle jaunaren hitzaldia
UPV/EHUko Klaustroan sartzeko

Discurso de ingreso en el Claustro de la UPV/EHU
a cargo del profesor **Manuel Yáñez**



Excma. y Magnífica Sra. Rectora
Excmas. e Ilmas. Autoridades Académicas
Señoras y señores
Amigas y amigos



Lamentablemente no sé hablar euskera, pero he querido, con la ayuda de mis amigos vascos, usar esta lengua para agradecer la gran generosidad de la EHU al nombrarme Doctor Honoris Causa de esta docta y prestigiosa institución, y por ello, desde este mismo instante acepto con placer y orgullo, el compromiso de servir a esta Institución y de contribuir a ensalzar su imagen y su prestigio, en la medida que mis pobres fuerzas y buen hacer alcancen.

Volviendo ahora, no a mi lengua mater, porque soy gallego, sino a nuestra lengua de instalación que es el castellano, debo añadir, en honor a la justicia, que aunque este reconocimiento se me concede a nivel individual, tiene mucho de colectivo, ya que, en mi dilatada carrera investigadora, toda mi producción científica, con la excepción de un único artículo publicado en el Journal of Physical Organic Chemistry en 1998, está firmada por varios autores, ya que la vida me ha otorgado el privilegio de encontrarme en mi andadura investigadora con una serie absolutamente excepcional de colaboradores, muchos de los cuales me han superado con creces, y de los que sólo puedo alardear de haber sido en algún momento pasado su supervisor. Sería muy prolijo el nombrarlos a todos aquí, pero me van a permitir que haga especial alusión a la Profa. Otilia Mó, mi más fiel y entrañable colaboradora, sin la que, prácticamente ninguna de las metas alcanzadas por este que habla y su grupo de investigación, habrían llegado a culminarse con éxito. Gracias Otilia! Pero si de verdad quiero hacer justicia a este especial momento, no me queda otra alternativa que reconocer que esta investidura debe entenderse como un reconocimiento, sin duda merecido, al colectivo de químicos teóricos y computacionales de este país, del cual me honro en formar parte. Es este colectivo, con sus denodados esfuerzos, el que ha llevado a la química teórica española a las más altas cotas de prestigio internacional, y nuestros jóvenes investigadores en este campo hoy se codean con lo más granado del colectivo internacional, hasta el punto de que, en el último Congreso Mundial de Química Teórica y Computacional celebrado el pasado mes de agosto en Munich, la participación de científicos españoles sólo era superada por los EE.UU. y Alemania, que era el país anfitrión. Debo remarcar en este punto que a la



proyección internacional de nuestro colectivo ha contribuido de un modo notabilísimo el ciclo de congresos bienales, que bajo el nombre genérico de ESPA, se vienen realizando desde el año 2000. Es además de justicia recordar aquí que la primera edición de estas Conferencias Internacionales en *Electronic Structure. Principles and Applications*, se organizó en esta Institución bajo la coordinación de mi padrino académico en este acto, el Prof. Ugalde.

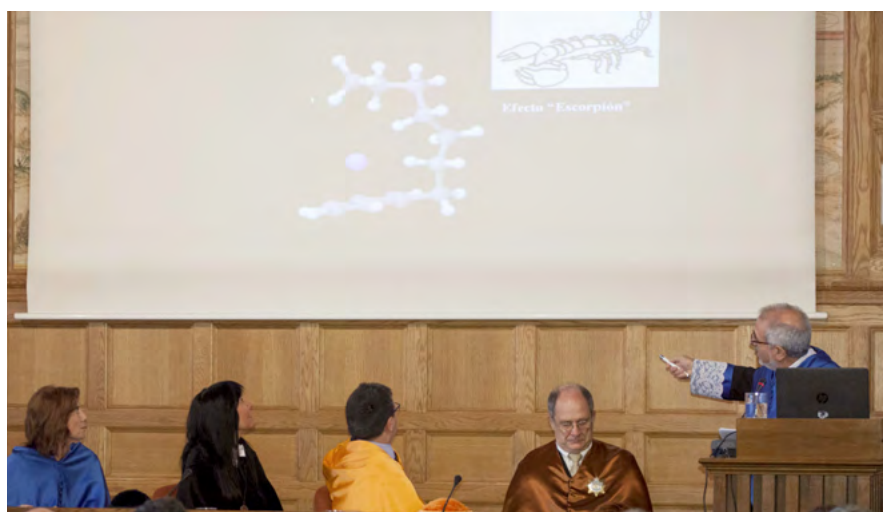
En realidad este escenario refleja el papel crucial jugado por la Química Teórica y Computacional en el desarrollo de la química moderna, porque fue la química teórica la que nos dotó de las herramientas necesarias para entender en profundidad el mundo que nos rodea. Este hecho que sería reconocido por la comunidad científica al concederle en 1998 el Premio Nobel de Química a John Pople, bajo cuya tutela tuve el privilegio de aprender casi todo lo que sé en este campo. Quince años más tarde, la ciencia internacional reconocería la contribución extraordinaria de estas herramientas en el tratamiento de los complejísimos sistemas que pueblan el mundo de la bioquímica, concediéndoles el Premio Nobel a Michael Levitt, Arieh Warshel y Martin Karplus, bajo cuya tutela también se formó un prestigioso profesor de esta Institución, Xabi López, y de cuyas enseñanzas se han beneficiado nuestros estudiantes del Doctorado Europeo en esta especialidad, gracias a la iniciativa del Donostia International Physics Center, DIPC, al organizar un precioso evento bajo un sugestivo nombre «Passion for Knowledge».

La realidad es que sólo la química teórica es capaz de darnos información sobre las propiedades intrínsecas de las moléculas, y que una pléyade de investigadores hicieron suya la idea magistralmente expresada por Eugene Wigner, Premio Nobel en 1963 cuando dijo «*es bueno que los ordenadores entiendan la situación, pero a mi me gustaría entenderla también*» y contribuyeron así a dotar a la química moderna de un sin número de modelos que ayudan a entender la realidad. Las propiedades intrínsecas de las moléculas son un paradigma de este escenario, porque las propiedades que las moléculas tienen *per se*, no son necesariamente las que tiene el colectivo, pero nos ayudan a comprender las propiedades macroscópicas, que son las que observamos. Ninguna otra técnica es capaz, *estricto sensu*, de estudiar una molécula aislada, porque aunque trabajemos en fase gas y a una muy baja presión, como una cien millonésima de atmósfera, el número de moléculas por cc todavía se cuentan por billones. En lo que sigue pues, voy a intentar mostrarles como con harta frecuencia las sustancias exhiben propiedades macroscópicas muy diferentes de las de las moléculas que las componen; pero lo que es más importante, que la única vía para entender nuestro Universo, es decir para entender estas propiedades macroscópicas, pasa por conocer las propiedades de los individuos y como estos individuos interaccionan entre sí cuando forman parte del colectivo.



Nada mejor para este menester que usar algunos ejemplos ilustrativos, alguno tan simple y cotidiano como el agua. Todo el mundo conoce el papel crucial del agua en la naturaleza y en el desarrollo y sustento de la vida, pero el agua desde el punto de vista químico es un compuesto absolutamente excepcional. De hecho, el agua es el único hidruro de los átomos del primer periodo que es líquido a temperatura ambiente, es también el paradigma de la neutralidad, ya que no es ni ácida ni básica; pero también es excepcional que su fase sólida, que llamamos hielo, sea menos densa que la fase líquida. Ciertamente nuestro universo sería muy diferente si el hielo no flotase! Pero el agua tiene además una enorme constante dieléctrica que le confiere la importante propiedad de ser un excelente disolvente de los compuestos iónicos. Estas sorprendentes características se pueden llegar a entender si uno conoce la estructura del agua y cómo las moléculas de agua interaccionan entre sí. La Química computacional muestra que la molécula de agua es un fuerte dipolo, ya que los electrones que unen el átomo de O con los de H se acumulan preferentemente sobre el primero, provocando una bipolaridad en el sistema, que explica que sea un magnífico disolvente de compuesto iónicos; pero todavía más importante es el





hecho de que una molécula de agua interacciona fuertemente con otra a través de lo que llamamos un enlace de hidrógeno (ver Figura 1). Es incluso más relevante el hecho de que cuando una tercera molécula entra en juego, el trímero es un ciclo. Esta disposición en la que una molécula de agua actúa a la vez como un ácido y como una base, explica por qué a pesar de que una molécula de agua aislada es mucho más básica que ácida, es decir capta con más facilidad iones H^+ que los transfiere, la diferencia entre estas dos propiedades van siendo menor a la vez que el agregado aumenta de tamaño y al llegar al sistema macroscópico la diferencia es nula, y el sistema es neutro.



Figura 1. Estructuras del monómero, dímero y trímero de agua. El monómero muestra la distribución de carga y el momento dipolar. El dímero y el trímero están estabilizados por enlaces de hidrógeno. Nótese que en el trímero cada monómero actúa a la vez como dador y como aceptor protónico. Mó, O.; Yáñez, M. and Elguero, J., J. Chem. Phys. 1992, 97, 6628-6638

Pero hay algo más. El volumen del trímero, debido a su estructura cíclica es notablemente mayor que la suma del volumen de los tres monómeros, lo que implica automáticamente una disminución de densidad; fenómeno que se hace más notorio a medida que agrandamos la escala, y pasamos a los pentámeros, los heptámeros o los decámeros (ver Figura 2), en los que las estructuras cíclicas, mucho más voluminosas están fuertemente favorecidas, lo que se refleja no sólo en la extraordinaria belleza de los cristales de hielo (ver figura 3), sino en el hecho de que estos cristales son mucho menos densos que el mismo número de moléculas desorganizadas en el estado líquido.



Figura 2. Estructuras de diferentes formas cíclicas del pentámero, octámero y decámero de agua.

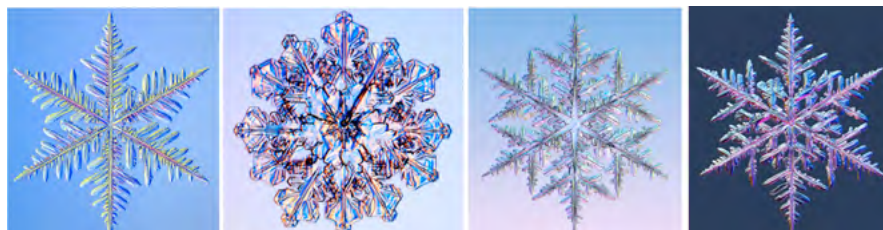


Figura 3. Diferentes formas de cristales de hielo que implican la existencia de una red de enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua que los forman.

Un segundo ejemplo que refleja las enormes diferencias entre el mundo macroscópico y microscópico es un símbolo de estabilidad bien conocido *urbi et orbe*, el oro. El oro es un metal químicamente inerte, y por ello ha sido la referencia de estabilidad en prácticamente todas las civilizaciones sobre la Tierra. Pero el oro de los lingotes o de nuestras joyas es un metal, formado por el ordenamiento tridimensional de átomos de este elemento. La cuestión es, ¿son las moléculas de oro igual de inertes que los lingotes? Nada mejor que una imagen para responder a esta pregunta. En la Figura 4a se compara el mapa de potencial elec-

trostático calculado para la molécula de Cl_2 , que es bien conocida por su alta reactividad, con el de la molécula de Au_2 . Podrán observar que son enormemente semejantes. La conclusión es obvia, la molécula de Au_2 debe ser fuertemente reactiva como lo es la de Cl_2 , y lo es! Al igual que lo son los agregados de Au de diferentes tamaños (ver Figura 4b) que se utilizan hoy en día como potentes catalizadores de un buen número de reacciones químicas.

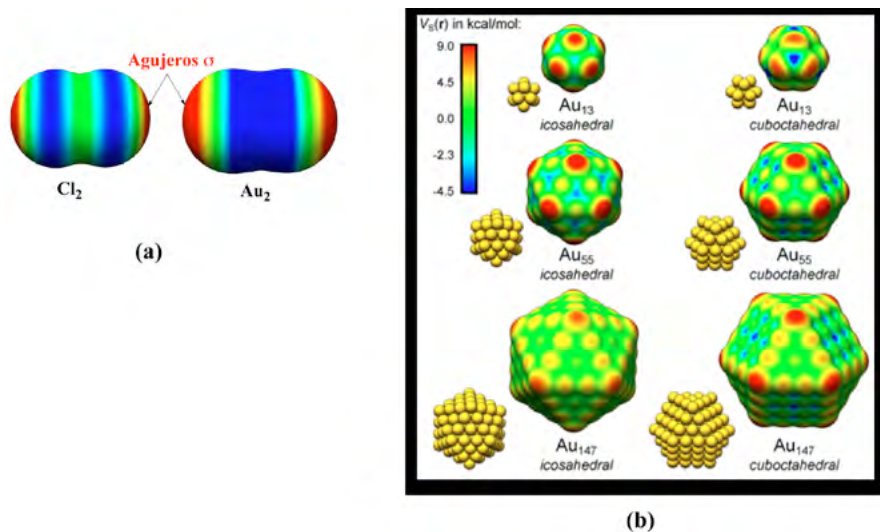


Figura 4. (a) Mapas de potencial electrostático creados por las moléculas de Cl_2 y Au_2 . Las zonas rojas son zonas de potencial negativo (agujeros σ), mientras que las azules son de potencial positivo. Ambas moléculas interactúan fuertemente con dadores electrónicos que se aproximan a los denominados agujeros σ . (b) Agregados de Au de diferentes tamaños mostrando que las zonas de alta reactividad se sitúan en los vértices de dichos agregados. Stenlid, J. H. and Brinck, T., *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 11012–11015

No es por tanto sorprendente la extraordinaria atención que se ha prestado en los últimos años a este tipo de estructuras, labor en la que el Prof. Ugalde y su grupo han hecho contribuciones importantes, caracterizando espectroscópicamente no sólo el dímero de oro¹, sino otros agregados de oro y aluminio², o de oro, carbono e hidrógeno³, o el carácter del

- 1 Geethalakshmi, K. R.; Ruiperez, F.; Knecht, S.; Ugalde, J. M.; Morse, M. D.; Infante, I., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, 14, 8732–8741.
- 2 Grande-Aztatzi, R.; Formoso, E.; Mercero, J. M.; Matxain, J. M.; Grabowski, S. J.; Ugalde, J. M., *J. Chem. Phys.* **2016**, 144, 114302.
- 3 Leon, I.; Ruiperez, F.; Ugalde, J. M.; Wang, L. S., *J. Chem. Phys.* **2016**, 145, 064304

enlace entre Au y gases nobles⁴. Son también ya pléyade los trabajos sobre el poder catalítico del Au o de los clusters de oro⁵, o su capacidad para interactuar con ligandos con pares libres⁶ o con ligandos de capa abierta⁷, sin olvidar el trabajo seminal del Prof. Pekka Pyykko sobre el papel del Au como fuerte pegamento capaz de mantener unidas cadenas de anillos aromáticos⁸.

Pero además la química computacional ayuda a encontrar respuestas difíciles de alcanzar desde un punto de vista estrictamente experimental. Este es el caso de la alta estabilidad de los complejos de Li^+ con derivados alquil-bencénicos, ya que las técnicas experimentales permiten medir con gran precisión la energía de interacción pero no permiten establecer cual es la estructura del complejo. Por el contrario esta estructura puede determinarse con gran precisión mediante cálculos mecanocuánticos, que demuestran que esta inesperada gran estabilidad se debe a la flexibilidad de la cadena alquílica, que se pliega como la cola de un escorpión para favorecer la interacción con el catión metálico (ver Figura 5), en un proceso que por razones obvias hemos denominado efecto escorpión.

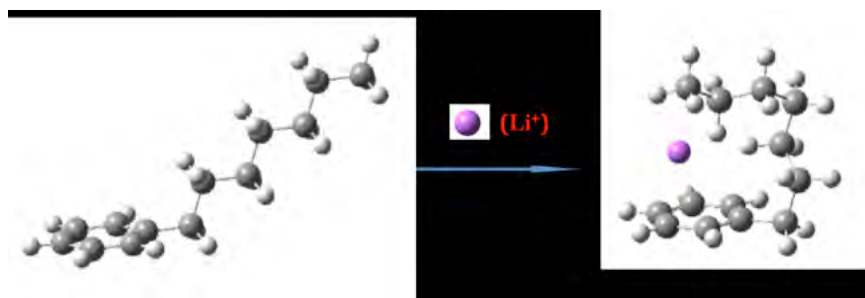


Figura 5. La interacción de cationes Li^+ con heptilbenceno conduce a un plegamiento de la cola alquílica, que incrementa significativamente la energía de interacción, en un mecanismo que fue bautizado como efecto escorpión. Mó, O.; Vázquez, M.; Gal, J.-F.; Maria, P.-C. and Decouzon, M., Chem. Eur. J. 2003, 9, 4330-4338

- 4 Grabowski, S. J.; Ugalde, J. M.; Andrada, D. M.; Frenking, G., Chem. Eur. J. 2016, 22, 11317-11328.
- 5 Bagi, A. H.; Khaledi, Y.; Ghari, H.; Arndt, S.; Hashmi, A. S. K.; Yates, B. F.; Ariafard, A., J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 14599-14608.
- 6 Rajskey, T.; Urban, M., J. Phys. Chem. A 2016, 120, 3938-3949.
- 7 Blasko, M.; Rajskey, T.; Urban, M., Chem. Phys. Lett. 2017, 671, 84-91.
- 8 Pyykko, P.; Hakala, M. O. and Zaleski-Ejgierd, P., Phys. Chem. Chem. Phys. 2007, 9, 3025-3030.

Además la química computacional permite explorar situaciones en condiciones límite. Uno de los más bellos ejemplos es un trabajo reciente en que se demuestra que, en contra de lo que cabría esperar de las leyes básicas de la física, se pueden formar dímeros de cationes y de aniones estabilizados a través de enlaces de halógeno. Como muestra la Figura 6, aunque los complejos formados son termodinámicamente inestables, porque su energía es mayor que la de los cationes (aniones) a distancia infinita, son cinéticamente estables ya que la disociación del complejo implica una barrera de activación muy significativa.

Incluso a veces, la química cuántica pone en cuestión conceptos *bien establecidos* como la tetravalencia del carbono. La detección en fase gas de complejos de fórmula $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_7^+$ planteaba la duda de cual era su posible estructura, una estructura capaz de explicar que dos átomos de Si unidos a un número impar de grupos metilo fuesen equivalentes.

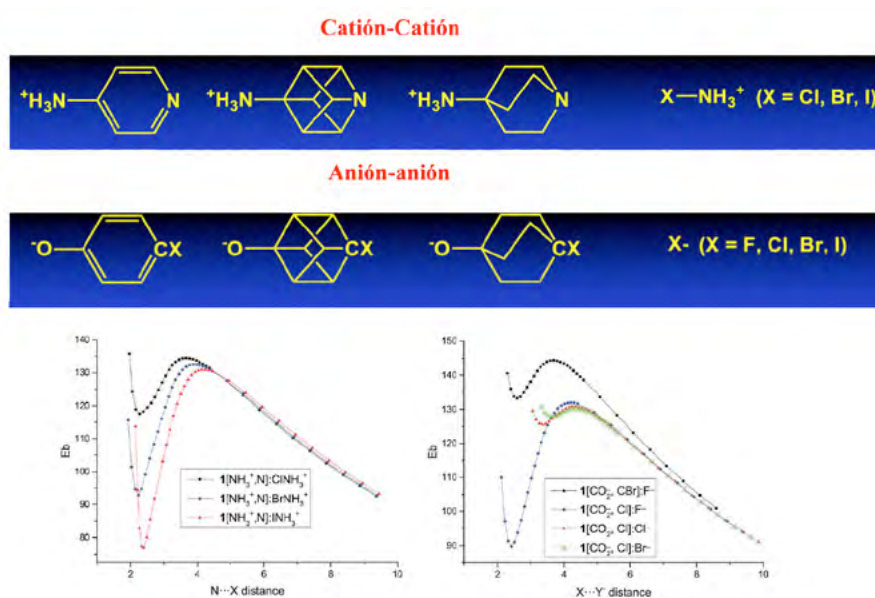


Figura 6. Las interacciones catión-catión y anión-anión mostradas en las bandas azules presentan las curvas de potencial mostradas en la parte inferior de la figura. Quiñonero, D.; Alkorta, I.; Elguero, J., Phys.Chem.Chem. Phys.,2016, 18, 27939

La química teórica proporcionó la explicación que se esquematiza en la Figura 7, donde se observa que el grupo metilo que se sitúa entre los dos átomos de Si tiene una estructura singular ya que es plano y está enlazado a sendos grupos $\text{Si}(\text{CH}_3)_3$, lo que implica que su átomo de C es *penta-*

valente. Este sorprendente resultado se puede explicar por la formación de un enlace a tres centros Si-C-Si como muestra el panel (b) de la Figura 7. Posteriormente el Prof. Frenking demostraría que tales estructuras son también estables si los átomos de Si son reemplazados por átomos de Ge o Sn.⁹

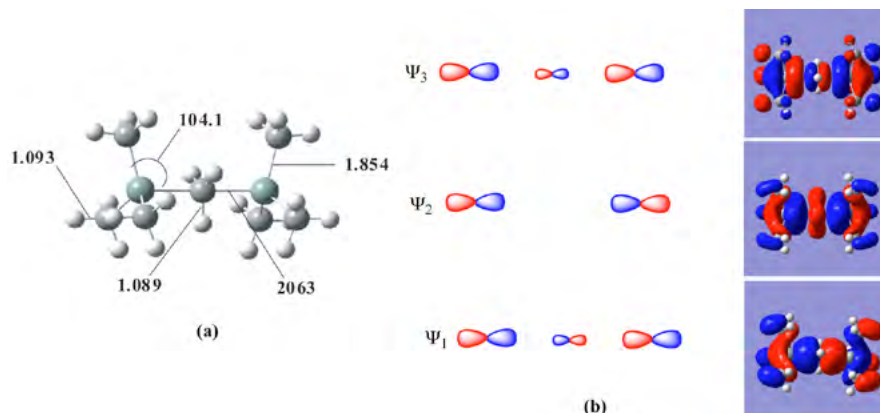


Figura 7. (a) Estructura calculada para el sistema $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_7^+$, donde las distancias están en Å. (b) Esquema y forma de los orbitales moleculares involucrados en la formación de un enlace Si-C-Si a tres centros, que explica la pentavalencia del C del metilo central. Dávalos, J.Z.; Herrero, R.; Abboud, J.L.M.; Mó, O. and Yáñez, M., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 381

Pero este es sólo un caso específico entre muchos de los descritos por el Prof. Frenking para átomos el grupo 14 (E) comenzando por los carbenos,¹⁰ y sus análogos de Si, Ge, Sn y Pb, en los que el átomo E central tiene dos enlaces R-E-R con electrones compartidos y un par libre, y llegando a los tetrylones en los que E actúa como un átomo divalente con dos pares libres.¹¹

La modelización teórica ha permitido igualmente identificar sistemas enlazados en los que uno de los átomos orbita en torno a una estructura estable. El primero de estos sistemas moleculares *planetarios* ha sido el complejo de fósforo blanco (P_4) con Li^+ , en el que, a temperatura ambiente, el Li^+ permanece enlazado al núcleo P_4 , pero con la libertad de orbitar a su alrededor, tal y como ilustra la Figura 8a, ya que las barreras energéticas para pasar de la zona en que el catión interactúa con una cara P_3 del tetraedro de fósforo, a la que interactúa con una arista P_2 del mismo

9 Fernández, I.; Uggerud, E. and Frenking, G., *Chem. Eur. J.* **2007**, 13, 8620-8626.

10 Boehme, C. and Frenking, G., *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, 118, 2039-2046.

11 Frenking, G.; Tonner, R.; Klein, S.; Takagi, N.; Shimizu, T.; Krapp, A.; Pandey, K. K. and Parameswaran, P., *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 5106-5139.

es más baja que la energía de agitación térmica a temperatura ambiente. Otros bellos sistemas planetarios serían descritos por el Prof. Ugalde y su grupo (ver Figura 8b) en los que el catión metálico orbita, en este caso libremente, alrededor de un ferroceno.

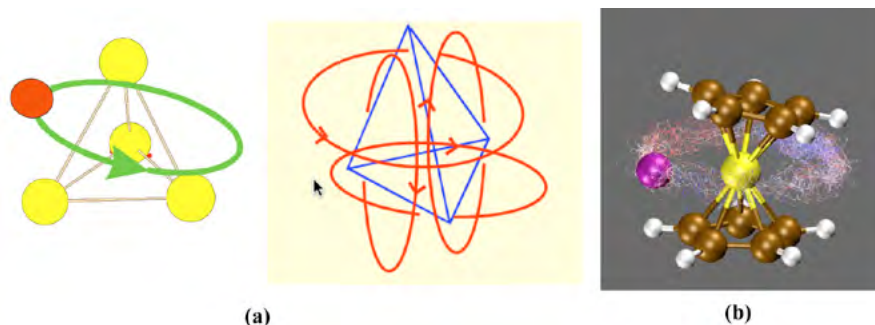


Figura 8. (a) Esquemas que muestran las trayectorias que a temperatura ambiente puede describir un catión de Li^+ enlazado a una unidad de P_4 . Abboud, J.L-M.; Alkorta, I.; Dávalos, J.Z.; Gal, J.-F.; Herreros, M.; Maria, P.C.; Mó, O.; Molina, M.T.; Notario, R. and Yáñez, M.; *J. Am. Chem. Soc.* **2000**, 122, 4451 (b) Trayectoria (anillo central) que describe un catión de Li^+ entorno a una unidad de ferroceno. Irigoras, A.; Mercero, J.M.; Silanes, I. and Ugalde, J.M., *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 5040

Hasta este momento les he presentado una serie de ejemplos, entresacados de los miles que se pueden encontrar en la literatura que corresponden a sistemas o procesos que ocurren en el estado fundamental, pero en nuestro universo hay todo un mundo de fenómenos que ocurren en los estados excitados de las moléculas, con harta frecuencia, como consecuencia de su interacción con la luz. En este campo la contribuciones de la química teórica en las últimas décadas han sido prodigiosas. Es imposible dar una idea de ello en una breve presentación como esta, no obstante voy a tratar, con un sucinto número de ejemplos, de transmitirles aunque solo sea una idea general de todo lo que nos espera en el futuro inmediato en este campo, y para ello que mejor que focalizar nuestra atención en los procesos involucrados en los daños producidos por la radiación. En un planeta en el que, una de las consecuencias de la contaminación, es el incremento de radiación de alta frecuencia que afecta a los seres vivos, la fotoestabilidad de nuestro ADN se ha convertido en un tema de absoluta prioridad.

A la comprensión de los mecanismos que están detrás de esta fotoestabilidad han contribuido los trabajos seminales de la Prof. Merchán y del Prof.

Serrano-Andrés, por desgracia prematuramente fallecido^{12,13}. Hoy en día son muchos grupos que, como el de la Dra. Corral de mi Departamento o la Prof. Leticia González de la Universidad de Viena, que recibió la Dirac Medal concedida por el WATOC en 2011, han continuado prestando especial atención a la simulación de estos complejos fenómenos. Así, mediante sofisticadas y costosas técnicas multiferenciales la Dra. Corral y sus colaboradores han podido analizar en detalle (ver Figura 9) los procesos que se abren por excitación electrónica de la 4-tiotimina, pudiendo concluir que la sustitución de carbonilos por tiocarbonilos tiene un efecto enorme sobre la fotofísica y la fotoquímica de estos sistemas incrementando la reactividad de las bases nucleicas.

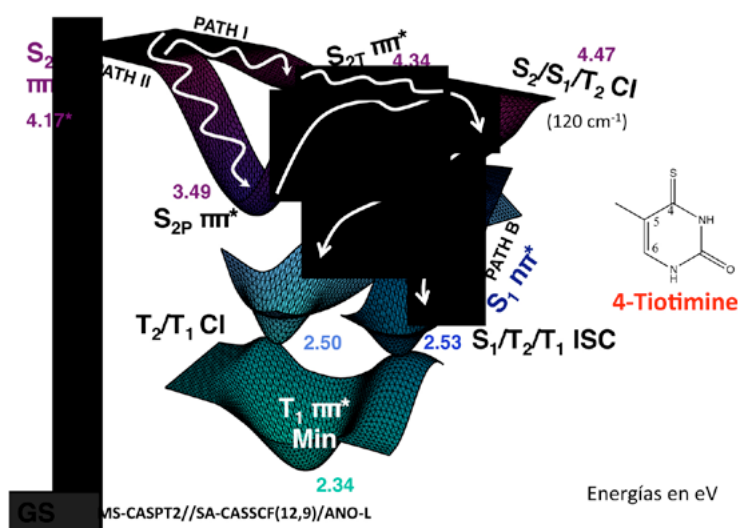


Figura 9. Topología de las superficies de energía potencial y principales caminos de reacción asociados con la foto-excitación de la tiotimina, obtenidos al nivel CASPT2. Martínez-Fernández, L.; Granucci, G.; Pollum, M.; Crespo-Hernández, C.E.; Persico, M. and Corral, I., *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 2619-2627

El análisis riguroso de estos complejos procesos requiere no sólo tener una buena descripción de la topología de los diferentes estados que puedan estar involucrados en la foto-estabilidad del ADN, caracterizando los posibles cruces entre sistemas, sino que es ineludible poder analizar la dinámica de

- 12 Ludwig, V.; da Costa, Z. M.; do Amaral, M. S.; Borin, A. C.; Canuto, S. and Serrano-Andrés, L., *Chem. Phys. Lett.* **2010**, 492, 164-169.
- 13 Sauri, V.; Gobbo, J. P.; Serrano-Perez, J. J.; Lundberg, M.; Coto, P. B.; Serrano-Andrés, L.; Borin, A. C.; Lindh, R.; Merchán, M. and Roca-Sanjuan, D., *J. Chem. Theory Comput.* **2013**, 9, 481-496.

los mismos. A esta tarea ha dedicado especial atención la Prof. González y su grupo diseñando un potente código que bajo el nombre SHARC (Surface Hopping including Arbitrary Couplings) (ver figura 10) está accesible a la comunidad científica internacional. Por medio de esta versátil herramienta, la Prof. González y su grupo han podido dar respuesta a preguntas fundamentales para entender el daño en el ADN inducido por la radiación como ¿cuántas nucleobases participan en la excitación? La absorción de luz ultravioleta ¿está dominada por la absorción de los monómeros o es una absorción colectiva? Las modificaciones estructurales asociadas a la excitación ¿juegan algún papel importante?

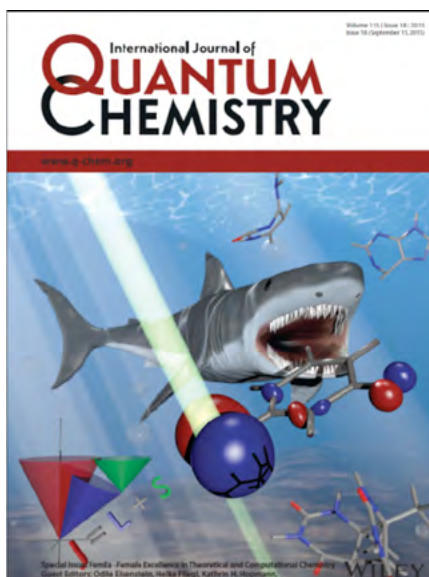


Figura 10. Portada de la revista International Journal of Quantum Chemistry que alude al código computacional SHARC diseñado por el grupo de la Prof. L. González (Univ. de Viena) para el estudio ab initio de la dinámica molecular de reacciones en estados excitados. Richter, M.; Marquetand, P.; González-Vázquez, J.; Sola, I. and González, L., J. Chem. Theory Comput. 2011, 7, 1253-1258; Int. J. Quantum Chem., 2015, 115, 1215-1231.

Que duda cabe que en esta somera reseña se han quedado fuera miles de procesos en cuya interpretación la química teórica y computacional ha jugado un papel crucial, como los fenómenos de fotoisomerización¹⁴, la re-

14 Gottle, A. J.; Dixon, I. M.; Alary, F.; Heully, J. L. and Boggio-Pasqua, M., J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 9172-9174.

lación entre quiralidad y conductividad,¹⁵ el diseño de semiconductores¹⁶ o de sistemas fotovoltaicos todo-orgánicos^{17,18}, o de MOFs (*metal-organic frameworks*) para múltiples aplicaciones desde la absorción selectiva de gases, catálisis o sensores¹⁹, la comprensión de los mecanismos de difusión Raman²⁰, las propiedades ópticas de nanoclusters²¹, el efecto de los enlaces de hidrógeno sobre la susceptibilidad de los péptidos a la oxidación²², los efectos del *docking* sobre la actividad de inhibidores en tratamientos contra la malaria²³, los avances extraordinarios en la comprensión del magnetismo molecular²⁴, o de los fenómenos de solvatación, cruciales en química²⁵, o en el estudio sobre amiloides para una mejor comprensión de la enfermedad de Alzheimer^{26,27}, los efectos de metales como el aluminio sobre el metabolismo de los glúcidos a nivel celular²⁸, las interacciones entre dicaciones y especies de interés biológico²⁹, los portentosos avances en nuestro conocimiento del enlace químico incluyendo los estados excitados³⁰, nuestro conocimiento sobre poliradicales y sus propiedades³¹, la búsqueda automática de mecanismos de reacción³², el conocimiento de

-
- 15 Biet, T.; Cauchy, T.; Sun, Q. C.; Ding, J.; Hauser, A.; Oulevey, P.; Burgi, T.; Jacquemin, D.; Vanthuyne, N.; Crassous, J. and Avarvari, N., *Chem. Commun.* **2017**, 53, 9210-9213.
 - 16 Escudero, D.; Duchemin, I.; Blase, X. and Jacquemin, D., *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, 8, 936-940.
 - 17 Garcia-Benito, I.; Zimmermann, I.; Urieta-Mora, J.; Arago, J.; Molina-Ontoria, A.; Ortí, E.; Martín, N. and Nazeeruddin, M. K., *J. Mater. Chem. A* **2017**, 5, 8317-8324.
 - 18 Souto, M.; Calbo, J. N.; Ratera, I.; Ortí, E. and Veciana, J., *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 11067-11075.
 - 19 Haldoupis, E.; Borycz, J.; Shi, H. L.; Vogiatzis, K. D.; Bai, P.; Queen, W. L.; Gagliardi, L. and Siepmann, J. I., *J. Phys. Chem. C* **2015**, 119, 16058-16071.
 - 20 Zhao, L. L.; Jensen, L.; and Schatz, G. C., *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 2911-2919.
 - 21 Gieseldng, R. L.; Ratner, M. A and Schatz, G. C., *J. Phys. Chem. A* **2016**, 120, 4542-4549.
 - 22 Chan, B.; Moran, D.; Easton, C. J. and Radom, L., *Chem. Asian J.* **2017**, 12, 1485-1489.
 - 23 MacDonald, C. A. and Boyd, R. J., *J. Mol. Graph. Model.* **2015**, 59, 117-122.
 - 24 Vela, S.; Mota, F.; Deumal, M.; Suizu, R.; Shuku, Y.; Mizuno, A.; Awaga, K.; Shiga, M.; No-voa, J. J. and Ribas-Arino, J., *Nature Comm.* **2014**, 5.
 - 25 Morales, N.; Galbis, E.; Martínez, J. M.; Pappalardo, R. R. and Sánchez-Marcos, E., *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, 7, 4275-4280.
 - 26 Mujika, J. I.; Pedregal, J. R. G.; López, X.; Ugalde, J. M.; Rodríguez-Santiago, L.; Sodupe, M. and Marechal, J. D., *Chem. Sci.* **2017**, 8, 5041-5049.
 - 27 Azimi, S. and Rauk, A., *J. Chem.Theory Comput.* **2013**, 9, 4233-4242
 - 28 Formoso, E.; López, X., *RSC Advances* **2017**, 7, 6064-6079.
 - 29 Salpin, J. Y.; Haldys, V.; Guillaumont, S.; Tortajada, J.; Hurtado, M. and Lamsabhi, A., *Chemphyschem* **2014**, 15, 2959-2971.
 - 30 Jara-Cortes, J.; Guevara-Vela, J. M.; Martín Pendás, A. and Hernández-Trujillo, J., *J. Comput. Chem.* **2017**, 38, 957-970.
 - 31 Reta, D.; Moreria, I. P. R. and Illas, F., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 24264.
 - 32 Varela, J. A.; Vázquez, S. A. and Martínez-Núñez, E., *Chem. Sci.* **2017**, 8, 3843-3851.

procesos relevantes en astroquímica³³ y química de la atmósfera³⁴, al igual que importantes innovaciones en catálisis³⁵, o en nuestro conocimiento sobre polioxometalatos^{36,37}, y en nuestra comprensión de un fenómeno tan relevante como la aromaticidad^{38,39}, los efectos de la excitación electrónica sobre la reactividad⁴⁰, nuestro conocimiento sobre líquidos iónicos⁴¹, o en espectroscopía rovibracional⁴², en la que la sinergia entre teoría y experimento es enormemente útil y prometedora⁴³, en química ultrarrápida de iones⁴⁴, química de fullerenos y fullerenos gigantes⁴⁵, así como en la caracterización de las interacciones intermoleculares⁴⁶ y un larguísimo etc. Pero no me resisto a mencionar aquí un novedosísimo campo en cuyo nacimiento la química teórica y computacional tuvo absoluto protagonismo, la Attoquímica. De la mano del Prof. Fernando Martín, galardonado recientemente con el Premio Jaime I en Investigación Básica, y en colaboración con grupos experimentales expertos en tecnología laser con pulsos ultra-cortos, ha sido posible seguir la dinámica electrónica de moléculas que ocurre en tiempos de attosegundos. Los sofisticados métodos teóricos desarrollados por el Prof. Martín, que van necesariamente más allá de la aproximación de Born-Oppenheimer, han permitido interpretar estos fenómenos ultrarrápidos que suponen nada menos que poder medir y

-
- 33 Redondo, P.; Martínez, H.; **Largo, A.** and **Barrientos, C.**, *Astron. Astrophys.* **2017**, 603.
 - 34 **Anglada, J. M.**; Crehuet, R.; Martins-Costa, M.; Francisco, J. S. and **Ruiz-López, M.**, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 12331-12342.
 - 35 Grinter, D. C.; Remesal, E. R.; Luo, S.; Evans, J.; Senanayake, S. D.; Stacchiola, D. J.; Graciani, J.; **Sanz, J. F.** and Rodríguez, J. A., *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, 7, 3866-3872.
 - 36 Jiménez-Lozano, P.; Solé-Daura, A.; Wipff, G.; **Poblet, J. M.**; Chaumont, A. and Carbó, J., *J. Inorg. Chem.* **2017**, 56, 4148-4156.
 - 37 Soriano-López, J.; Musaev, D. G.; Hill, C. L.; Galán-Mascarós, J. R.; Carbó, J. J. and **Poblet, J. M.**, *J. Catalysis* **2017**, 350, 56-63.
 - 38 García-Borrás, M.; Osuna, S.; Luis, J. M.; **Solà, M.**, *Chem. Commun.* **2017**, 53, 4140-4143.
 - 39 **Solà, M.**, *Frontiers in Chemistry* **2017**, 5.
 - 40 Ferro-Costas, D.; Francisco, E.; Martín Pendás, A. and **Mosquera, R. A.**, *Chemphyschem* **2016**, 17, 2666-2671.
 - 41 Sánchez, M. L.; Corchado, J. C.; Martín, M. E.; Galván, I. F.; Barata-Morgado, R. and **Aguiar, M. A.**, *J. Comput. Chem.* **2015**, 36, 1893-1901.
 - 42 Cerezo, J.; Bastida, A.; **Requena, A.** and Zúñiga, J., *J. Quant. Spectr. Radiative Trans.* **2014**, 147, 233-251.
 - 43 Uriarte, I.; Perez, C.; Caballero-Mancebo, E.; Basterretxea, F. J.; Lesarri, A.; **Fernández, J. A.** and Cocinero, E. J., *Chem. Eur. J.* **2017**, 23, 7238-7244.
 - 44 Bolognesi, P.; Bañares, L. and **Alcamí, M.**, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 19533-19535.
 - 45 Wang, Y.; **Díaz-Tendero, S.**; Alcamí, M. and Martín, F., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 19646-19655.
 - 46 Lefebvre, C.; Rubez, G.; Khartabil, H.; Boisson, J. C.; **Contreras-Garcia, J.** and Henon, E., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 17928-17936.



controlar el movimiento electrónico en sistemas moleculares complejos como ilustra la Figura 11.

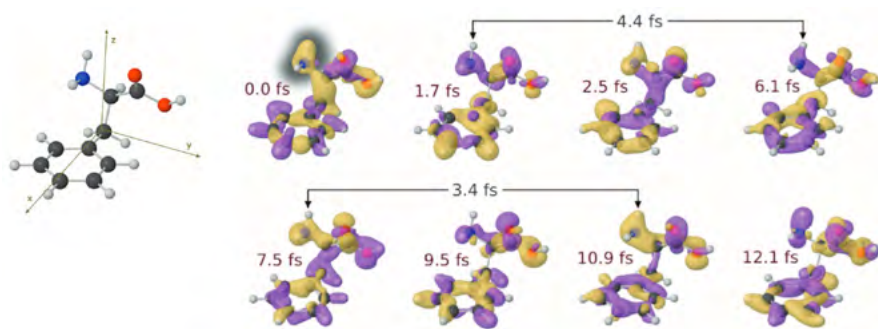


Figura 11. Dinámica ultra-rápida de la fenilalanina iniciada por pulsos de attosegundos. Calegari, F.; Ayuso, D.; Trabattoni, A.; Belshaw, L.; De Camillis, S.; Anumula, S.; Frassetto, F.; Poletto, L.; Palacios, A.; Decleva, P.; Greenwood, J. B.; Martin, F. and Nisoli, M., *Science* **2014**, 346, 336-339; Nisoli, M.; Decleva, P.; Calegari, F.; Palacios, A. and Martin, F., *Chem. Rev.* **2017**, 117, 10760-10825.

Es evidente que por querencias personales, muchos de los ejemplos que he usado para mostrar el enorme papel dinamizador de la simulación por métodos de la química teórica, corresponden a lo que se suele denominar ciencia básica, pero ello no excluye en absoluto que no haya innumerables aplicaciones con implicaciones tecnológicas importantísimas, algunas mencionadas de refilón in mi anterior presentación, como podrían ser los dispositivos fotovoltaicos; pero me van a permitir que rompa aquí una lanza a favor de la ciencia básica, porque vivimos en un mundo muy tecnificado, y donde la practicidad es la gran diosa, lo que lleva a los políticos a rendirle casi una absoluta pleitesía, favoreciendo casi exclusivamente la ciencia aplicada; pero no se engañen, sin ciencia básica no hay ciencia que aplicar. Esta idea la expresó magistralmente el Profesor Pedro Etxenique con el simple título de su conferencia como Académico de Número de la RAC: «La sublime utilidad de la ciencia inútil». De un modo más prosaico, yo suelo decirle a mis estudiantes que si alguien les hubiese preguntado a los creadores del primer laser en 1960 sobre la utilidad de su hallazgo, estoy convencido de que hubiesen contestado, «demostrar que la emisión estimulada de luz es posible» pero hubiesen sido incapaces de anticipar ni la milésima parte de las aplicaciones prácticas que hoy en día tienen los láseres en los más variados dominios de la ciencia, la medicina, la tecnología, las comunicaciones o el comercio. O ¿se imaginan ustedes la expresión de Joseph Fourier si alguien le dijese la revolución que supuso su famosa Transformada en el desarrollo de la espectroscopía moderna de alta

resolución? Por todo ello y en la situación actual en que se han reducido drásticamente las inversiones en ciencia en nuestro país, y en particular en ciencia básica tengo que recurrir una vez más a la sabiduría de Pedro Etxenique y repetir alto y claro a los responsables políticos lo que él dijo en la Academia de Ciencias: «La riqueza de las Naciones se deberá cada vez más a la riqueza de las **Nociones**». Sublime!!! No hay nada que añadir.

Llegados a este punto sólo me queda pedir la indulgencia del lector si mi relato no llegó a captar su interés. A los que comienzan a caminar en la senda de la ciencia recordarles lo que le matemático Yves Meyer, Premio Abel 2017, dijo recientemente en una entrevista en Madrid «*algo que me encanta de la ciencia es que nada es exactamente de la forma que lo sueñas*». ¡Preciosa invitación a seguir soñando!, pero sobre todo recordar lo que dos excelentes investigadores todavía activos, P. B. Armentrout y J. L. Beauchamp afirmaban en las postrimerías del siglo XX «*...y todavía quedan tantas preguntas sin responder...*».



Hezkuntza sailburu **Cristina Uriarte**
andrearen mintzaldia

Intervención de la Consejera de Educación,
Cristina Uriarte



Errektore andrea,
Idazkari nagusia,
Gipuzkoako campuseko errektoreorde jauna,
Agintariak, klaustrokideak, lagunak,



Egun on guztioi, eta zorionak Albert Fert eta Manuel Vañez irakasleei. Gaur zuei aitortza egitera etorri gara, merezitako errekonozimendua zalantzarik gabe.

Jakin bezala, Honoris Causa doktore izendapena ohorezko titulu bat da, eta beronekin pertsona batek bere bizitzan zehar izan duen lehen mailako ibilbidea saritu nahi da. Sarritan ibilbide horrek ez du unibertsitate munduarekin zer ikusirik izaten, baina honako honetan oso estua da zientzialari bi hauen eta unibertsitate munduaren arteko lotura.

Gure gizartearentzako, ohore bat da zalantzarik gabe bi irakasle hauek oraindik aurrera Euskal Herriko Unibertsitateko doktore izatea.

Sin duda, para la Universidad del País Vasco es todo un honor contar con dos nuevos Doctores Honoris Causa de un reconocido prestigio profesional.

Investigadores que además colaboran en los avances de los equipos de investigación de Química Teórica y de Magnetismo de la facultad de Química de la UPV-EHU.

Una colaboración que pone de manifiesto el beneficio que su trabajo aporta a estos equipos, pero que también refleja el nivel de nuestros equipos de investigación, lo que posibilita que científicos de primer nivel como Albert Fert y Manuel Vañez, se integren en sus proyectos y colaboren en sus objetivos.

Albert Fert eta Manuel Vañez irakasleen ibilbidea eta meritua ondo baino hobeto azpimarratu dute nire aurretik hitz egin duten aita bixiek. Albert Fert fisikariaren ekarpenak magnetismoaren alorrean eman dira, eta Manuel Vañez kimikariarenak gas faseko kimika molekularrean. Arlo horietan lan egin ez dutenentzat seguruenik lan ulergaitzak, baina pisu eta garrantzi handikoak zalantzarik gabe.

Gaurko ekitaldi honekin, ospe handiko bi doktore berri bereganatu ditugu euskal unibertsitatearentzat. Eta horretan aita bitxiak eta beren ikerketa-taldeek badute zer esanik.

Doktore Honoris Causa hauek UPV/EHUko Kimika Fakultateko iker-tzaileekin duten harremanari esker dauzkagu, eta horixe azpimarratzea gustatuko litzaidake.



Kimika Fakultateko Magnetismo ikerketa-taldearen eta Kimika Teorikoaren ikerketa-taldearen mailari esker sortu diren harremanak eta kolaborazioak bi doktore berri hauek gure etxean hartzeko aukera eman digute.

Eta hori da bidea, zalantzarik gabe. Elkarlana, eta bultzada gure zientzialariei. Euskadik, ikerketaren mundu zabal honetan, bere bidea darrai, ibilbide sendoa eta indartsua.

Duela egun batzuk, 2016ko Euskadiko Zientzia Txostena aurkeztu nuen. Eta bertan jasotzen diren zenbakiak eta eboluzioa azpimarratze-koak dira. Gure ikerketa taldeek publikatutako ikerketa kopurua asko hasi da azken urteetan.

Aldizkari espezializatu ospetsuenek jasotzen dituzte jada Euskaditik bultzatutako artikulu gehienak.

Gure zientzialariek, Estatu Batuetako, Frantzia, Alemania edota Italiako zientzialariek kolaboratzen dute. Eta antza denez, asko estimatzen gaituzte mundu mailan. Krisi garaiko urte hauetan, Euskadik munduko bazter guztietatik zientzialariak jaso ditu, bereziki Ikerbasqueren bitartez. EHUk jasotzen ditu ikertzaile horietatik gehienak.

Zientzia eta ikerkuntza munduarentzat herri erakargarria garelako esan dezakegu, jakin bai dakite guretzako zientzia bultzatzea, ikerkuntza bultzatzea estrategikoa dela.

Gure etorkizunari begira beharrezkoa delako, eta epe laburrera, inbertitzen dugun euro bakoitza bikoiztu egiten delako, ikertzaile berriak kontratatzeke aukera handituz.

Eta bide horretatik jarraitzeko borondatea dugu. Gure etorkizunak hori eskatzen digulako. Etorkizunean ere Albert Fert eta Manuel Yañez bezalako ikerlariak nahi ditugulako gure artean. Horretarako, administrazioek zientzia bultzatzen jarraitu behar dugu, baina aldi berean ikasle gazteen zientziarako bokazioak ere landu beharra ditugu.

Ez naiz gehiago luzatuko. Zorionak benetan gure Honoris Causa Doktore berri biei, eta zorionak baita ere EHUri, zientzialari bi hauen lan-kidetza izateagatik.

Eskerrik asko.



Unibertsitateko errektore **Nekane Balluerka**
andrearen mintzaldia

Intervención de la Rectora Magnífica de la Universidad,
Nekane Balluerka



Hezkuntza sailburu andrea;
Gipuzkoako Campuseko errektoreorde jauna;
Kimika Fakultateko dekanu andrea;
Euskal Herriko Unibertsitateko idazkari nagusi jauna;
Albert Fert eta Manuel Yáñez irakasle jaunak,
Julian González eta Jesús Ugalde irakasle jaunak
eta aitabitxiak; agintariok; jaun-andreok; lagunok.



Ekitaldi honetako nire lehenengo hitzak esker ona adierazteko izatea nahi dut, Albert Fert eta Manuel Yáñez irakasleei esker ona adierazteko, hain zuzen.

Lehenik eta behin, egin duten ekarpen zientifikoagatik, baina baita gure unibertsitatean, Kimika Fakultatearen bidez eta Campus honetako hainbat ikastegiren bidez, ikasketak finkatzen egindako lanagatik, lan garrantzitsua garatu dutelako.

Uste dut garrantzitsua dela nabarmentzea UPV/EHUko Honoris Causa doktore izendapena bi ikertzaile ospetsuk jaso dutela, eta biak, neurri batean, diziplina bera lantzen duten ikertzaileak direla. Mundua ezagutzeko ahaleginak neurtzea eskatzen du, eta neurtzeko, beharrezkoa dugu zientzia. Zientziarik gabe, hutsean geldituko litzateke mundua ulertzeko ahalgin oro.

Alde horretatik, Jesus Ugalde irakasleak Charles Percy Snow-ren baieztapen esanguratsu bat ekarri digu gogora bere hitzetan: «zientzia gizadiaren obra kolektibo eder eta zoragarriena da». Etxenike irakasleak honako hau erantsi zion esaldi horri: «zientzia gizadiaren obra — *artistiko*— eder eta zoragarriena da».

Uste dut edertasun horren zatirik handiena giza jakintzaren izaera sinkronizatu eta harmonizatuan oinarritzen dela, pixkana-pixkana eraikin nagusia bilakatuz doan jakintza. Hala eta guztiz ere, beste ikuspegi batetik, zientzia giza jakin-minaren adierazpenik handiena ere bada, gizakiak ikasteko, unibertsoa ulertzeko eta hura gobernatzen duten gakoak argitzeko duen grinaren erakuslerik onena.

Hoy es un día muy importante para la universidad del País Vasco. Aceptamos en nuestro claustro académico a dos relevantes figuras de la ciencia

contemporánea, como ha sido adecuadamente expresado por los profesores Julián Martínez y Jesús Ugalde.

El profesor Albert Fert no necesita presentación. Y no solo por su condición de Premio Nobel de Física, obtenido en 2007 y por su notable obra, sino por la larga, intensa y fructífera relación que ha mantenido con nuestro país, con nuestra universidad y con distintos grupos de investigación dentro de la misma.

I would like to congratulate Professor Albert Fert on his Honorary Doctorate. And I would also like to express our pride and our satisfaction that he, as of day, is a member of the senate of the University of the Basque Country. Our relationship with Professor Fert has been long and fruitful. I am sure that the honour we are conferring on him will give a new impetus to that relationship: it has been of great importance to many researchers and many students of our institution. Thank you, Professor Fert, for so many years of work at the University of the Basque Country.

Como nos ha recordado el profesor Julián González, debemos al profesor Fert el descubrimiento del efecto de magnetorresistencia gigante. Este



descubrimiento supuso una auténtica revolución científica, que abrió un campo inédito de aplicaciones tecnológicas y que, a la postre, supuso también un cambio radical de orden social y cultural.

Me gustaría llamar la atención sobre esa estrecha relación de causa-efecto, que tantas veces se ha producido, a lo largo de la historia, con motivo de nuevos avances científicos.

Primero asistimos a un descubrimiento en algún campo de la ciencia. A continuación se produce una revolución tecnológica con motivo de sus aplicaciones concretas. Y, en un tercer estadio, el cambio tecnológico desencadena un cambio de hábitos personales y culturales, la mayoría de las veces acompañado por un incremento del bienestar.

Ese proceso se reproduce constantemente a lo largo de la historia. Como he referido, comporta un avance constante del progreso humano y un cambio en sus condiciones objetivas, tanto en los recursos de la tecnología como en su bienestar físico y psicológico.

Por su parte, el profesor Manuel Yáñez ha desarrollado su trabajo dentro del campo de la Química Teórica y Computacional. Y, al igual que el profesor Albert Fert, también guarda una larga y estrecha relación con la Universidad del País Vasco. Su colaboración ha sido decisiva para que los postgrados y los programas de doctorados de la UPV/EHU, vinculados con su especialidad, se hayan colocado en un plano de prestigio internacional.

Y, volviendo a la reflexión que había iniciado, quería completarla con una aportación del propio profesor Yáñez en su intervención: «sin ciencia básica, no hay ciencia que aplicar».

El proceso de avance científico, aplicación tecnológica y aumento del bienestar a veces se desencadena de forma automática. Pero a veces no es así: a veces no se produce de forma mecánica e inmediata.

En ese sentido, el debate social que se produce con relación a la ciencia básica comparte los prejuicios que también despiertan, en ciertos sectores sociales, la docencia y la investigación en arte y humanidades. Es esa frase despreciable que muchas de las personas aquí presentes hemos escuchado en más de una ocasión. La frase es: Y eso, ¿para qué vale?».

Es inconcebible, para cualquier persona que ame el conocimiento, realizar ese deslinde cicatero entre lo útil y lo inútil, aplicando además el criterio moral de que lo útil es lo valioso y lo inútil lo desprovisto de valor.

Si esos prejuicios son frecuentes en ciertas áreas de las humanidades, ahora que la ciencia, afortunadamente, comienza a abrirse paso en el debate social, se plantea la misma dialéctica. En ese sentido hay que valorar en su



justa medida la referencia del profesor Yáñez: «sin ciencia básica, no hay ciencia que aplicar».

No hay conocimiento útil, valioso y legítimo, por una parte, y conocimiento inútil, no valioso e ilegítimo, por otra. La historia de la ciencia está plagada de ejemplos de conocimientos alumbrados en un momento concreto de la historia y que solo después, o mucho después, adquirieron aplicaciones relevantes.

Muchos de los descubrimientos de la ciencia no son premeditados. Son fruto de una metodología científica rigurosa, sí, pero insisto, no son premeditados. Y si el descubrimiento científico es a menudo casual, no digamos ya sus aplicaciones posteriores.

Lo valioso del conocimiento humano no es la aplicación posterior en tecnologías más o menos aplaudidas en función de su valor social. Me atrevería a decir que ni siquiera un nuevo descubrimiento, en tanto que aumento del patrimonio cultural, es en sí mismo valioso.

Lo que hace verdaderamente valioso el conocimiento es que nos ayude a comprender. Nos ayuda a comprender el universo. Y nos ayuda a comprender a la misma humanidad, nos ayuda a comprendernos, como seres pensantes, con objetivos, con proyectos, con principios morales, como entidades que intentan descifrar el lugar en que se encuentran y que procuran también que ese lugar pueda ser en el futuro un lugar mejor.

Por eso hay que defender el conocimiento, todo el conocimiento, como una aportación igualmente valiosa. En primer lugar porque, en todo caso, nos ayuda a comprender, y en segundo lugar porque, a corto o medio o largo plazo, puede que sea el soporte de aplicaciones útiles para el bienestar.

El profesor Ugalde ha dicho que «las moléculas son como palabras, los átomos son las letras». Creo que esa es una metáfora feliz que se puede extender a otros niveles: cualquier nueva unidad de conocimiento es una nueva

letra que añadimos al abecedario, y con ella ampliamos la combinatoria de signos que nos sirve para forjar más palabras con sentido y para, sobre ellas, forjar más oraciones que amplíen y enriquezcan el discurso racional.

Es un motivo de profunda alegría que la Universidad del País Vasco acoja hoy en su claustro a dos científicos tan relevantes como los profesores Albert Fert y Manuel Yáñez. A su aportación científica le añadimos su intensa relación con nuestra universidad, a la que han dedicado esfuerzo, trabajo y cariño.

Aitormen altuena eman diegu bi zientzialari bikaini, eta gaur bezalako ekitaldi batek erakusten du Euskal Herriko Unibertsitatearentzat ohore handia dela gure klaustroan Fert eta Yáñez irakasleak izatea.

Gure unibertsitatea Euskal Herriak dituen energietan oinarritu izanda, baina aintzat hartuta, betiere, jakintzak ez daukala mugarik, eta barne-energia hori urrunago iristeko indarra izango dela. Ibilbide horretan, nekez egingo genuen aurrera, mundu osoko irakasle, ikertzaile eta intelektuaren ekarpenik gabe. Unibertsitateak jakintza du xede: jakintzaren sorkuntza eta transmisioa (Eman Ta Zabal Zazu leloak dioen moduan). Eta jakintzak, berez, ez du mugarik, hizkuntzari, geografiari edo kulturari dagokienez: ez du izan halako mugarik iraganean; ez du, gaur egun; ezta izango ere, etorkizunean.

Ildo horretatik, Albert Fert eta Manuel Yáñez doktoreen ekarpena funtsezkoa izan da Euskal Herriko Unibertsitateko zientzialarien belaunaldi berrien prestakuntzarako. Eta gure klaustroko kide izateko gonbita onartu izana eskertzeko beste arrazoi bat da, zalantzarik gabe.

Abentura intelektualak, nola pertsona bakarrarenak hala unibertsitate osoarenak, berrikuntzaren eta iraganekoaren arteko dialektika du oinarri; hurbilekoaren eta urrunekoaren arteko dialektika, sustraien eta adarren arteko dialektika. Hala, Euskal Herriko Unibertsitateak gure herrian ditu erroak, baina mundu osora zabalik ageri dira haren adarrak.

Hain zuzen ere, munduan egoteko dugun modu horren erakusgarri da Fert eta Yáñez doktoreek ikerketan eta irakaskuntzan egindako lana: gure lurrian ditugu oinarriak, baina beti gogoan izanik jakintzak ez duela mugarik.

Eskerrik asko zuen arretagatik.

Eta, ekitaldi akademikoetan esaten dugun moduan:

Eman Ta Zabal Zazue





eman ta zabal zazu



Universidad del País Vasco Euskal Herriko Unibertsitatea