



Discurso de ingreso en el Claustro de la UPV/EHU a cargo del profesor Manuel Yañez.

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 EEUU 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 complejísimo 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 senso***, 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.

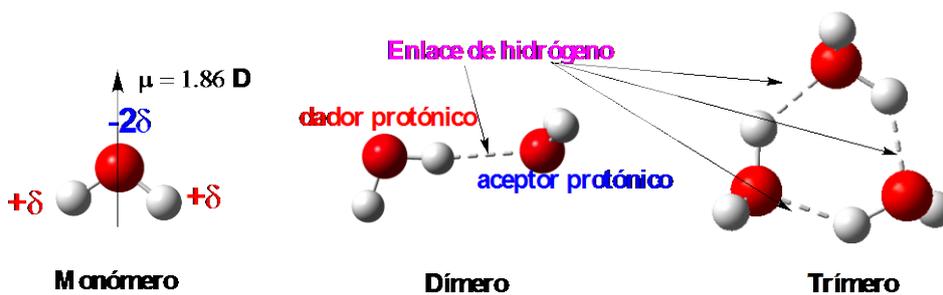


Figura 1. Estructuras del monómero, dímero y trímero de agua. El monómero muestra la distribución de carga y el momento dipolar. El dímero y el trímero están estabilizados por enlaces de hidrógeno. Nótese que en el trímero cada monómero actúa a la vez como dador y como aceptor protónico. Mó, O.; Yañez, 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.

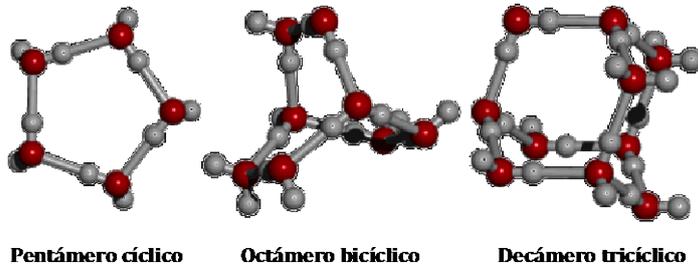


Figura 2. Estructuras de diferentes formas cíclicas del pentámero, octámero y decámero de agua.

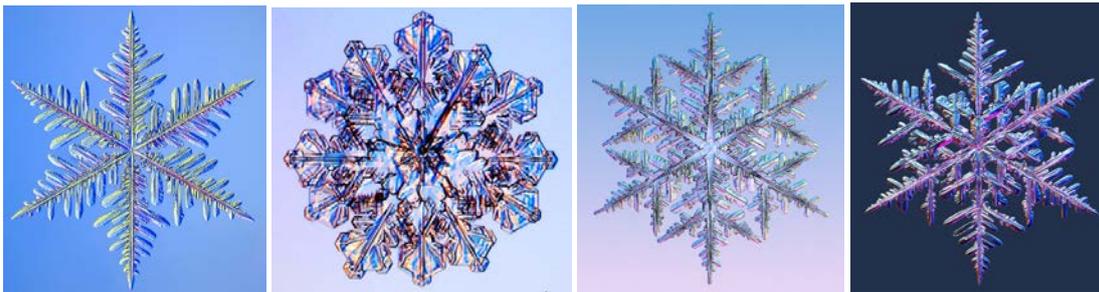


Figura 3. Diferentes formas de cristales de hielo que implican la existencia de una red de enlaces de hidrógeno entre las moléculas de agua que los forman.

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 electrostático 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.

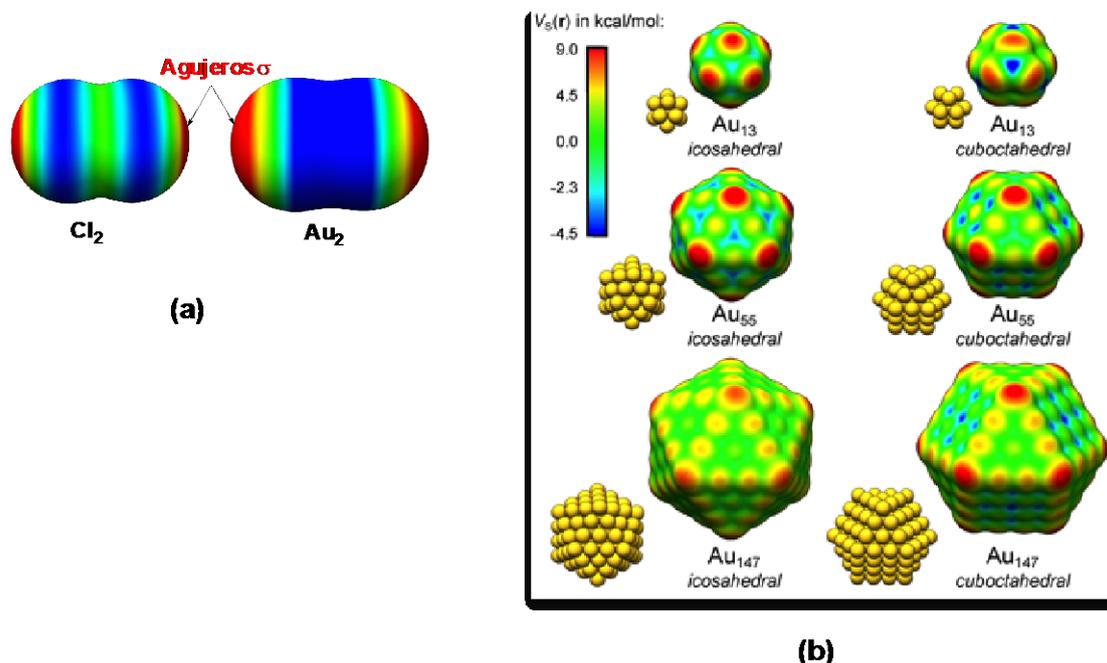


Figura 4. (a) Mapas de potencial electrostático creados por las moléculas de Cl_2 y Au_2 . Las zonas rojas son zonas de potencial negativo (agujeros σ), mientras que las azules son de potencial positivo. Ambas moléculas interactúan fuertemente con dadores electrónicos que se aproximen a los denominados 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 oro,¹ sino otros agregados de oro y aluminio,² o de oro, carbono e hidrógeno,³ o el carácter del enlace entre Au y gases nobles.⁴ Son también ya pléyade los trabajos sobre el poder catalítico del Au o de los clusters de oro,⁵ o su capacidad

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

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.

para interactuar con ligandos con pares libres⁶ o con ligandos de capa abierta,⁷ sin olvidar el trabajo seminal del Prof. Pekka Pyykko sobre el papel del Au como fuerte pegamento capaz de mantener unidas cadenas de anillos aromáticos.⁸

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*.

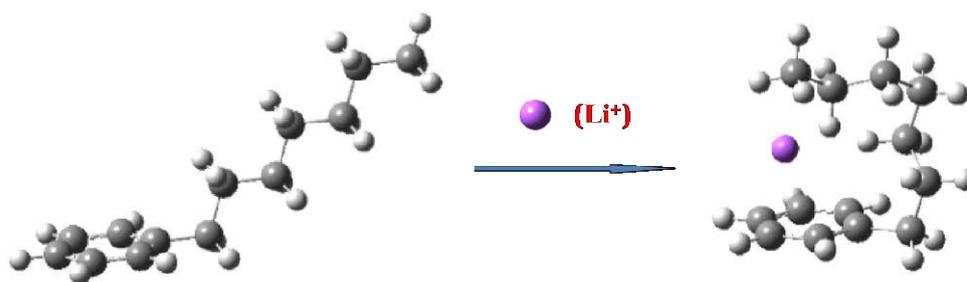


Figura 5. La interacción de cationes Li^+ con heptilbenceno conduce a un plegamiento de la cola alquílica, que incrementa significativamente la energía de interacción, en un mecanismo que fue bautizado como efecto escorpión. Mó, O.; Yañez, M.; Gal, J.-F.; Maria, P.-C. and Decouzon, M., Chem. Eur. J.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

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.

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.



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.

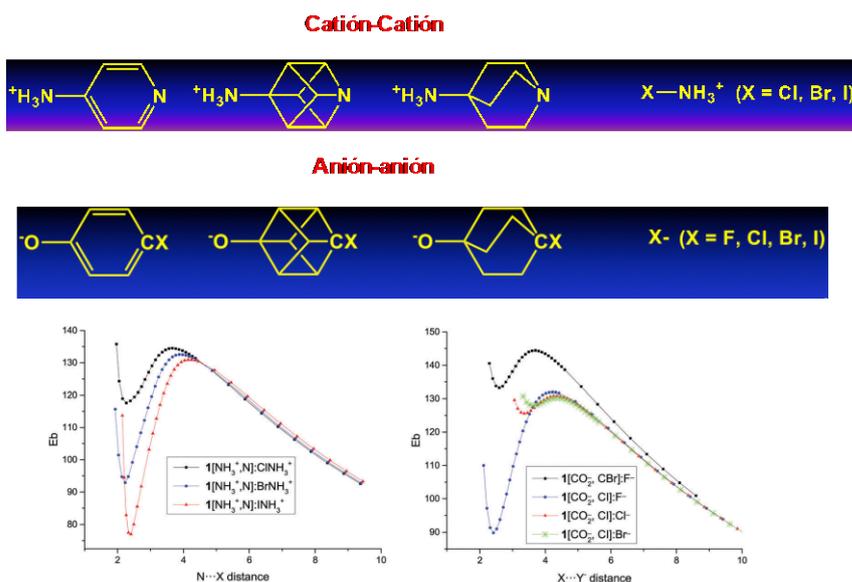


Figura 6. Las interacciones catión-catión y anión-anión mostradas en las bandas azules presentan las curvas de potencial mostradas en la parte inferior de la figura. Quiñonero, D.; Alkorta, I.; Elguero, J., *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2016, 18, 27939

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 *pentavalente*. 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

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

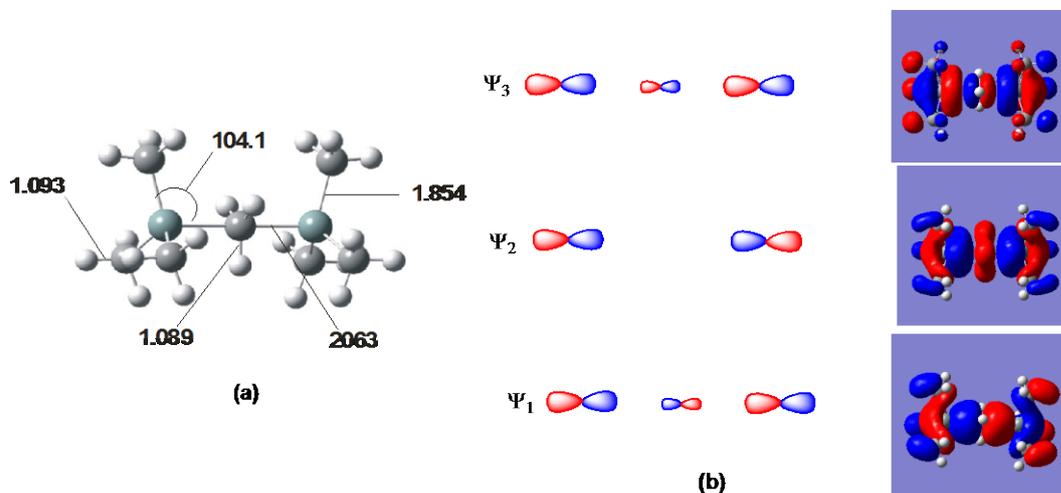


Figura 7. (a) Estructura calculada para el sistema $\text{Si}_2(\text{CH}_3)_7^+$, donde las distancias están en Å. **(b)** Esquema y forma de los orbitales moleculares involucrados en la formación de un enlace Si-C-Si a tres centros, que explica la pentavalencia del C del metilo central. Dávalos, J.Z.;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

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.

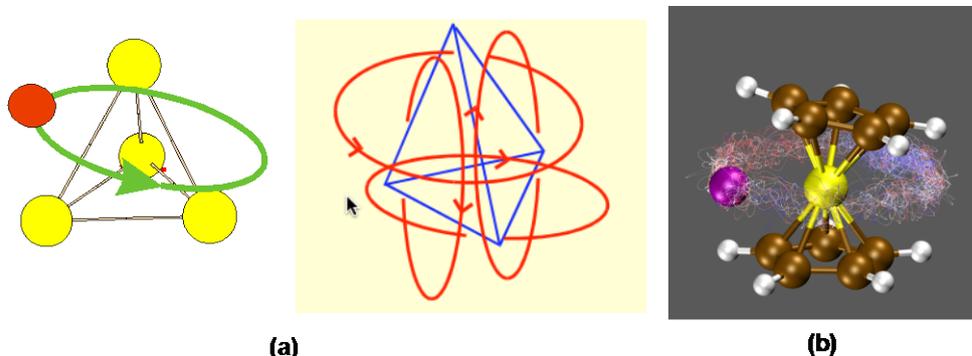


Figura 8. (a) Esquemas que muestran las trayectorias que a temperatura ambiente puede describir un catión de Li^+ enlazado a una unidad de P_4 . Abboud, J.L-M.; Alkorta, I.; Dávalos, J.Z.; Gal, J.-F.; Herreros, M.; Maria, P.C.; Mó, O.; Molina, M.T.; Notario, R. and Yañez, M.; *J. Am. Chem. Soc.* 2000, 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

¹² Ludwig, V.; da Costa, Z. M.; do Amaral, M. S.; Borin, A. C.; Canuto, S. and Serrano-Andres, L., *Chem. Phys. Lett.* 2010, 492, 164-169.

¹³ Sauri, V.; Gobbo, J. P.; Serrano-Perez, J. J.; Lundberg, M.; Coto, P. B.; Serrano-Andres, L.; Borin, A. C.; Lindh, R.; Merchán, M. and Roca-Sanjuan, D., *J. Chem. Theory Comput.* 2013, 9, 481-496.



continuado prestando especial atención a la simulación de estos complejos fenómenos. Así, mediante sofisticadas y costosas técnicas multireferenciales 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.

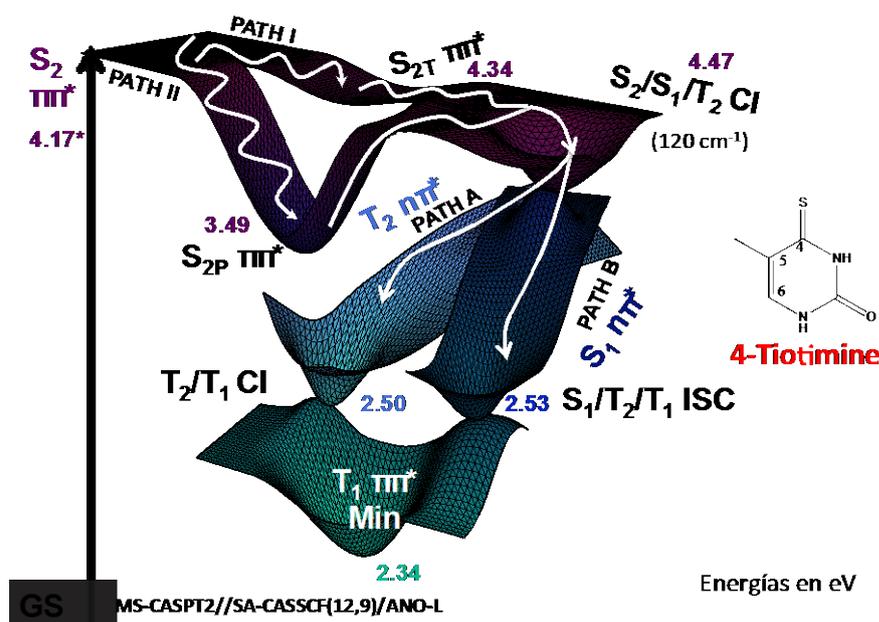


Figura 9. Topología de las superficies de energía potencial y principales caminos de reacción asociados con la foto-excitación de la tiotimina, obtenidos al nivel CASPT2. Martínez-Fernández, L.; Granucci, G.; Pollum, M.; Crespo-Hernández, C.E.; Persico, M. and Corral, I., Chem. Eur. J. 2017, 23, 2619-2627

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 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?

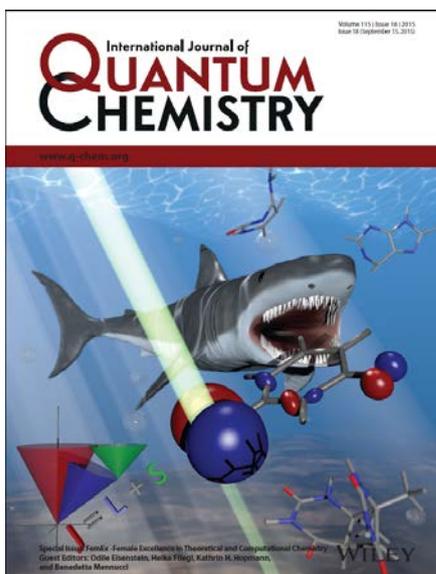


Figura 10. Portada de la revista International Journal of Quantum Chemistry que alude al código computacional SHARC diseñado por el grupo de la Prof. L. González (Univ. de Viena) para el estudio ab initio de la dinámica molecular de reacciones en estados excitados. Richter, M.; Marquetand, P.; González-Vázquez, 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 fotoisomerización,¹⁴ la relación 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 sensores,¹⁹ la compresión de los mecanismos de difusión Raman,²⁰ las propiedades ópticas de nanoclusters,²¹ el efecto de los enlaces de hidrógeno sobre la susceptibilidad de los péptidos a la oxidación,²² los efectos del *docking* sobre la actividad de inhibidores en tratamientos contra la

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

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.; Martin, 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.



malaria,²³ los avances extraordinarios en la comprensión del magnetismo molecular,²⁴ o de los fenómenos de solvatación, cruciales en química,²⁵ 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 celular,²⁸ las interacciones entre dicaciones y especies de interés biológico,²⁹ los portentosos avances en nuestro conocimiento del enlace químico incluyendo los estados excitados,³⁰ nuestro conocimiento sobre poliradicales y sus propiedades,³¹ la búsqueda automática de mecanismos de reacción,³² el conocimiento de procesos relevantes en astroquímica³³ y química de la atmósfera,³⁴ al igual que importantes innovaciones en catálisis,³⁵ 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 reactividad,⁴⁰ nuestro conocimiento sobre líquidos iónicos,⁴¹ o en espectroscopía rovibracional,⁴² en la que la sinergia entre teoría

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.; Novoa, 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.

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 Ruíz-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.; Musaeu, 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 Aguilar, M. A., *J. Comput. Chem.* **2015**, *36*, 1893-1901.

y experimento es enormemente útil y prometedora,⁴³ en química ultrarápida de iones,⁴⁴ química de fulerenos y fulerenos gigantes,⁴⁵ 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 ultrarápidos que suponen nada menos que poder medir y controlar el movimiento electrónico en sistemas moleculares complejos como ilustra la Figura 11.

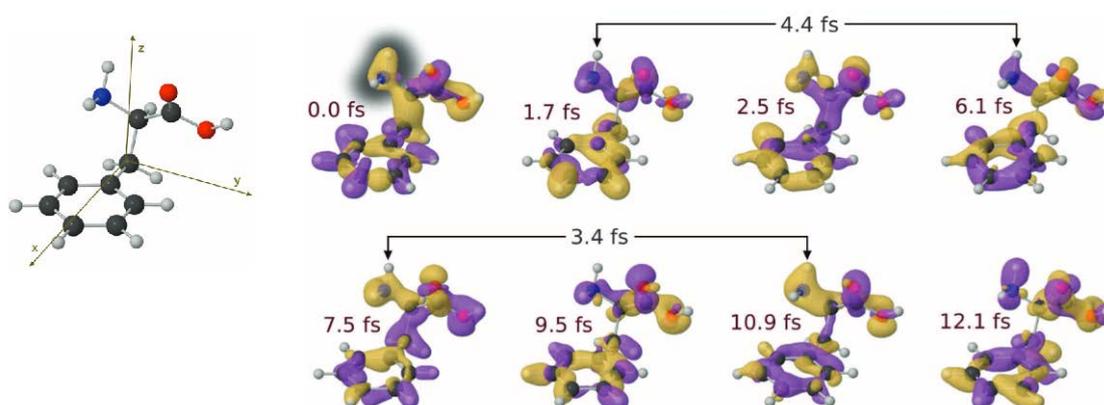


Figura 11. Dinámica ultra-rápida de la fenilalanina iniciada por pulsos de attosegundos. Calegari, F.; Ayuso, D.; Trabattoni, A.; Belshaw, L.; De Camillis, S.; Anumula, S.; Frassetto, F.; Poletto, L.; Palacios, A.; Decleva, P.; Greenwood, J. B.; Martín, F. and Nisoli, M., *Science* **2014**, 346, 336-339;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

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-García, J. and Henon, E., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 17928-17936.



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..."**