

## OTILIA MÓ Y MANUEL YÁÑEZ: DOCENTES, INVESTIGADORES Y PROMOTORES DE LA QUÍMICA TEÓRICA EN ESPAÑA Y EUROPA

*Manuel Alcamí Pertejo*  
*Fernando Martín García*  
*Catedráticos Departamento de Química. UAM*

### 1. NOTAS BIOGRÁFICAS

Sería imposible escribir un artículo de homenaje a Otilia Mó sin hacerlo a la vez de Manuel Yáñez o viceversa hacerlo de Manuel Yáñez sin estar haciéndolo a la vez de Otilia Mó. Sus enormes logros científicos y personales los han conseguido en común. Es la historia de dos personas muy especiales, que se han complementado para escribir una historia común de éxito científico y de dedicación a la enseñanza universitaria.



*Otilia Mó y Manuel Yáñez*

Otilia Mó (nacida en Lira, Pontevedra el 24 de Diciembre de 1947) y Manuel Yáñez (nacido en Lugo el 22 de Enero de 1948) se conocieron en la Universidad de Santiago de Compostela, donde estudiaron Químicas. A ambos les unían orígenes muy humildes y, si consiguieron alcanzar estudios universitarios, fue gracias a ayudas y becas que no eran fáciles de conseguir en aquellos años. El compromiso que han mostrado durante toda su carrera con un sistema educativo público, que garantice la igualdad de oportunidades de los estudiantes independientemente de su origen social, tiene en ellos las profundas raíces que da el haberlo vivido en primera persona desde la educación primaria.<sup>1</sup>

Al final de sus estudios, ambos recibieron el premio extraordinario de licenciatura y decidieron dedicarse a la química teórica: una disciplina que en aquellos momentos (1970) empezaba a desarrollarse, en especial gracias a la creciente disponibilidad para uso de la comunidad científica de centros de computación (los ordenadores personales, tal y como los conocemos hoy en día, aún tardarían más de una década en llegar).

El primer paso fundamental en su trayectoria científica fue desplazarse a la Universidad Laboral de Cheste, donde ejercieron como profesores contratados e iniciaron sus respectivas tesis

---

<sup>1</sup> Los detalles de su historia personal se pueden leer en su autobiografía incluida en el número especial de J. Phys. A. Chem, publicado recientemente en ocasión de su jubilación (J. Phys. A. Chem, 122, 5673, 2018)

doctorales bajo la dirección del profesor José Ignacio Fernández Alonso, investigador pionero de la Química Cuántica en España. En 1971, a raíz del nombramiento del profesor Fernández Alonso como catedrático de la UAM, Otilia y Manuel, en ese momento estudiantes de doctorado, se incorporan a la UAM, donde finalizan sus tesis en 1974. Ese año, dan el segundo paso fundamental de su carrera y deciden realizar una estancia postdoctoral de dos años en la Universidad Carnegie Mellon, en Pittsburgh, Pennsylvania, para trabajar con John Pople, probablemente el investigador más relevante en el campo de la química teórica de la segunda mitad del siglo XX.

John Pople fue el pionero en el desarrollo de programas de uso generalizado que, basándose en primeros principios de la mecánica cuántica, permitieran predecir propiedades como la estructura de moléculas, sus niveles energéticos o su reactividad. Por estos desarrollos, John Pople fue galardonado con el premio Nobel de Química en 1998. Al finalizar su estancia postdoctoral en 1976, Otilia y Manuel se reincorporan a la UAM como profesores adjuntos, pero esta experiencia postdoctoral marcará toda su trayectoria científica, que estará centrada desde entonces en el desarrollo y aplicación de estas nuevas metodologías a la comprensión de distintos aspectos de la reactividad química.

## **2. SUS APORTACIONES CIENTÍFICAS: ENTENDER UNA NUEVA QUÍMICA, LA QUÍMICA EN FASE GAS**

En los años 70 se produjeron avances significativos que condujeron al auge de la química cuántica. Uno de ellos fue la aparición de ordenadores cada vez más potentes y accesibles, lo que abrió las puertas a la resolución de las ecuaciones de la mecánica cuántica, la famosa ecuación de Schrödinger, para sistemas tan complejos como son las moléculas. La comunidad científica empezó a contar con herramientas que permitían predecir las propiedades de muchas moléculas y, lo que es más importante, permitían comprender el origen de esas propiedades y desarrollar modelos sencillos para sistematizar el comportamiento de distintas familias de moléculas y su reactividad.

El otro avance significativo se produce en el campo experimental, donde empiezan a aparecer técnicas cada vez más sofisticadas para estudiar las propiedades de moléculas en fase gas. Tradicionalmente, muchas de las propiedades conocidas de las moléculas estaban basadas en experimentos realizados en disolución y, por lo tanto, eran reflejo no sólo de las propiedades de dichas moléculas, sino también de su interacción con el medio. El acceso a datos en fase gas permite determinar las propiedades intrínsecas de moléculas aisladas, dando lugar en muchos casos a resultados que desafiaban la intuición química, más propensa a considerar procesos químicos que se producen en solución.

Estos avances, la posibilidad de realizar cálculos precisos de moléculas y medir sus propiedades intrínsecas (sin efecto del disolvente), se producen en paralelo, lo que permite que los resultados de los cálculos sean directamente comparables con las medidas en fase gas. Es en esta área donde las contribuciones de Otilia Mó y Manuel Yáñez van a ser claves y no es de extrañar que a lo largo de su carrera gran parte de sus trabajos se haya desarrollado en colaboración con grupos experimentales que estudian la química en fase gas.

De hecho, la química nació en la fase gaseosa, no en solución. Muchas reacciones químicas responsables de la formación de precursores moleculares que posteriormente evolucionaron a sistemas moleculares más complejos, incluyendo aquellos que dieron origen a la vida, ocurrieron en el universo primitivo, en el medio interestelar. Además, las reacciones que ocurren en la fase gaseosa afectan nuestra vida cotidiana tanto como las que ocurren en disolución, por ejemplo, dictando la composición y la calidad del aire que respiramos o controlando la cantidad de radiación que puede penetrar en la atmósfera de Tierra. Por lo tanto, la química en fase gaseosa ha sido y sigue siendo un área de investigación muy activa.

Una vez reincorporados a la UAM en 1976, iniciaron sus propias líneas de investigación en esta área y sus grandes contribuciones no tardaron en llegar. En 1978 publican su dos primeros artículos en el Journal of the American Chemical Society, una de las revistas de mayor impacto en Química, en la que hoy en día es difícil publicar, pero aún más en una época en la que la financiación de la ciencia en España era muy escasa. Esos dos artículos, además, abordan temáticas distintas dentro de los estudios en fase gas, ya que el primero está dedicado al estudio de la basicidad en fase gaseosa y el segundo al estudio de los enlaces de hidrógeno. Son éstas precisamente las dos temáticas en las que sus contribuciones han sido más relevantes a lo largo de su carrera. Ese mismo año comienzan a trabajar en una tercera línea de investigación dedicada al estudio de colisiones atómicas, relevantes para entender los mecanismos de enfriamiento de los plasmas de fusión nuclear, y la descripción de estados autoionizantes en átomos y moléculas, un tipo de estados infinitamente excitados del que poco o nada se sabía en aquella época por no ser tratables con ninguno de los métodos quimicuánticos existentes en la época.

La acidez y la basicidad son propiedades clave en Química, ya que marcan el valor del pH del que todos hemos oído hablar. Precisamente las propiedades acido-base de una sustancia son de las que más están afectadas por el hecho de que las medidas se realicen en disolución o en fase gas. Conocer el valor intrínseco de la basicidad en fase gas cambió de una forma drástica los modelos que existían para explicar las tendencias de acidez y basicidad, y fue este un campo donde Otilia y Manuel hicieron contribuciones muy relevantes, estudiando de forma sistemática amplias familias de compuestos como indoles, azaindoles, imidazoles o pirazoles, y estableciendo relaciones entre la distribución de carga en una molécula y su basicidad. Posteriormente, ampliaron estos estudios a las interacciones entre moléculas orgánicas y cationes de distintos metales, y relacionaron las tendencias observadas con propiedades fundamentales como los potenciales electrostáticos creados por las moléculas o la forma de la distribución de densidad electrónica dentro de las mismas.



*Reunión en la Residencia La Cristalera de la UAM (18-20 de junio de 1998). De esta reunión surgieron los programas interuniversitarios de doctorado y máster en Química Teórica y Modelización Computacional (TCCM) y la serie de conferencias Electronic Structure Principles and Applications (ESPA)*

En paralelo, en estos primeros años comenzaron sus aportaciones al estudio de enlaces de hidrógeno, un tipo fundamental de enlace en química que explica desde las propiedades del agua hasta la estabilidad de biomoléculas como el ADN. De nuevo su aportación original fue estudiar este tipo de enlaces desde el punto de vista de la fase gas, es decir determinando las propiedades intrínsecas de los enlaces de hidrógeno y utilizando toda la maquinaria teórica que se había desarrollado en esos años: cálculos de alto nivel necesarios para describir correctamente una interacción muy débil y técnicas de análisis de la densidad electrónica que permitían caracterizar la naturaleza de los enlaces y sistematizar los resultados.

En esta línea de investigación, continuada en las siguientes décadas, en colaboración con el grupo de José Elguero e Ibón Alkorta del CSIC en Madrid, han explorado de forma sistemática una gran variedad de sistemas. Su innovador trabajo en trímeros de agua, que permitió establecer por primera vez la existencia de efectos cooperativos, sigue siendo hoy en día su artículo más citado. Posteriormente extendieron este estudio a sistemas más complejos como metanol, metanol mezclado con agua o ácido fosfónico. Además, han sido pioneros en la exploración enlaces de hidrógeno dentro de una misma molécula (enlaces intramoleculares).

En el campo de las colisiones atómicas, en colaboración con Antonio Macías y Armando Riera, desarrollaron códigos que allanaron el camino para estudiar procesos de transferencia de carga inducidos por proyectiles muy rápidos, como los que existen en el interior de los tokamaks donde se producen los procesos de fusión nuclear. Al mismo tiempo, Manuel dio los primeros pasos hacia la extensión de dichos códigos para el estudio de estados autoionizantes en átomos y moléculas, contribuyendo a la introducción de las técnicas de discretización del continuo en el mundo de la Química Cuántica.

A finales de la década de 1980, Manuel y Otilia ya eran conocidos químicos teóricos con colaboraciones bien arraigadas que involucraban a grupos experimentales líderes en química de iones en fase gaseosa, como los grupos de Robert Taft en la Universidad de California y Fulvio Cacace en Roma. Sin embargo, fue a principios de la década de 1990 cuando comenzaron algunas de sus colaboraciones más fructíferas. Con el grupo experimental de José Luis Abboud en el CSIC en Madrid, abrieron las puertas a la investigación de la reactividad intrínseca de varias familias de compuestos y sistemas con altas tensiones de enlace, como cubano, adamantano, tetrafosfacubano o  $P_4$  y al establecimiento de la regla de activación-refuerzo de enlaces (BAR), que predice que la protonación en el átomo más electronegativo de un enlace produce un debilitamiento del mismo, mientras que la protonación en el átomo menos electronegativo produce el efecto contrario.



*Foto de los asistentes a la entrega del doctorado Honoris Causa por la Universidad del País Vasco a Manuel Yáñez. Al homenaje acudieron 40 profesores de universidades españolas y europeas participantes en el proyecto TCCM*

También durante esta década, Manuel y Otilia iniciaron una colaboración con los grupos experimentales de Jean-Pierre Morizur, Jeanine Tortajada y Jean-Yves Salpin (Evry Val d'Essone, Paris) en el estudio de la reactividad de biomoléculas en fase gaseosa con diferentes cationes metálicos. Estas colaboraciones, aún en curso, han dado lugar a más de 50 publicaciones, en las que se ha desentrañado la naturaleza de la interacción de metales como  $Cu^+$ ,  $Cu^{2+}$ ,  $Ni^+$  y  $Ca^{2+}$  con aminoácidos, azúcares o bases de ADN. En los últimos 20 años, han mantenido una fuerte actividad de investigación que ha llevado a la predicción de nuevos fenómenos en química: han introducido el "efecto escorpión" como una forma de mejorar las basicidades de iones de litio en derivados de bencilo. Han explorado, en colaboración con el grupo experimental de Jean Claude Guillemin

(Rennes), las propiedades de nuevas familias de compuestos basados en elementos poco habituales como arsénico, antimonio, boro o galio.

También vale la pena mencionar su trabajo pionero en la definición y caracterización de los compuestos de berilio que establecen un nuevo tipo de conectores moleculares: el enlace de berilio. Han demostrado que las bases convencionales, como la anilina, se pueden convertir por interacción, a través de enlaces de berilio, en ácidos más fuertes que la mayoría de los oxiácidos conocidos como el ácido fosfórico o la predicción de derivados de berilio que puede actuar como captadores extremadamente eficaces de aniones (esponjas aniónicas). Cabe destacar que Otilia también ha hecho importantes contribuciones en los últimos años al estudio de los derivados del ferroceno, en colaboración con el grupo experimental de Isabel Cuadrado en la UAM.

### **3. SUS APORTACIONES EN DOCENCIA Y GESTIÓN: LA FORMACIÓN DE LA RED DE POSGRADO INTERNACIONAL EN QUÍMICA TEÓRICA Y MODELIZACIÓN COMPUTACIONAL**

Manuel y Otilia no solo han realizado descubrimientos científicos fundamentales que nos ayudaron a comprender una variedad de procesos químicos en fase gaseosa utilizando las herramientas teóricas más avanzadas, sino que también han desempeñado un papel de liderazgo en el impulso de la química cuántica como campo de investigación en Europa y, en particular, en España. A finales de la década de 1990, promovieron la creación de un programa de doctorado común en Química Teórica y Modelización Computacional en España y Europa (conocido como TCCM por sus siglas en inglés). Su gran entusiasmo y compromiso, así como su carácter visionario, les permitieron reunir en 1998 en la Residencia La Cristalera de la UAM a representantes de 17 universidades españolas en un proyecto común.

De esa reunión surgió un doctorado interuniversitario en Química Teórica que agrupaba a 17 universidades españolas y que se convirtió en una realidad en 1999, obteniendo desde el primer momento la mención de excelencia. También de aquella reunión surgió la iniciativa de realizar un congreso bienal, que se celebra siempre en España, pero que tiene un fuerte carácter internacional. Esta serie de congresos, conocida como ESPA (Electronic Structure: Principles and Applications), sigue celebrándose 20 años más tarde y es una de las conferencias de mayor prestigio a nivel mundial dentro de la química teórica.

No se detuvieron aquí: cinco años después, en el momento que se empezaban a definir en Europa los programas de máster, lanzaron un máster en TCCM con 42 universidades de 8 países europeos. Este máster internacional de dos años de duración ha recibido la máxima distinción en Europa a través del sello Máster Erasmus Mundus y es hoy en día una referencia para los estudios de química teórica en Europa. Más recientemente, han extendido la colaboración internacional a un programa de doctorado conjunto TCCM, que ha recibido en los últimos cuatro años financiación europea a través de un proyecto de ITN-JD (Innovative Training Network - Joint Doctorate). Los proyectos ITN son los programas de doctorado mejor financiados dentro del programa Horizonte 2020 de la Unión Europea.

Su pasión por transmitir el conocimiento a las futuras generaciones de científicos ciertamente ha dejado una huella indeleble en varias generaciones de estudiantes. Todos aquellos que hemos tenido el placer y la suerte de poder asistir a sus clases de licenciatura o máster recordaremos sin duda el entusiasmo de Manuel en sus explicaciones, capaz de transmitir emociones en un desarrollo matemático o asombro antes sus posibles aplicaciones. También recordaremos las preguntas de Otilia obligándonos a plantearnos dudas nuevas sobre aspectos fundamentales de la Química. A lo largo de estos años han dirigido 15 tesis doctorales. La mayor parte de los doctores que formaron siguen trabajando en investigación y en varios casos se han convertido en líderes mundiales en sus respectivos

campos, habiendo recibido reconocimiento nacional e internacional a través de la concesión de prestigiosos premios<sup>2</sup>.

También es digno de destacar el papel crucial de Otilia en la promoción del papel de la mujer en la ciencia, a través de sus diversas responsabilidades administrativas a nivel nacional e internacional, como por ejemplo directora del instituto de la mujer de la UAM. A nivel nacional, Otilia también ha sido decisiva en la configuración del desarrollo de la ciencia en España, ya que durante un año fue Directora General de Programas y Transferencia de Conocimiento de la Secretaría de Estado de Universidades del Ministerio de Ciencia e Innovación.

En una nota final, no podríamos terminar este homenaje sin mencionar que, además de sus esfuerzos incansables para producir ciencia al más alto nivel y asegurar que esta ciencia se transmita a las generaciones futuras, Manuel y Otilia también son conocidos por "otros" importantes logros que compartieron desinteresadamente con sus colegas científicos. Los "almendrados" de Manuel, una especie de galletas hechas de clara de huevo y almendras, y las rosquillas de Otilia son ampliamente conocidos y altamente valorados por sus colaboradores, incluidos los autores de este artículo. Cualquier celebración especial en su laboratorio siempre estuvo acompañada de estas delicias. A pesar de haber abandonado su tierra natal, Galicia, a los veinticuatro años para comenzar una carrera científica en Madrid, Manuel y Otilia nunca perdieron los vínculos con sus orígenes. Por el contrario, dondequiera que vayan, son entusiastas promotores de esta región (a menudo olvidada) de España. Estamos seguros de que tendremos muchas otras oportunidades para disfrutar y aprender sobre estas y otras actividades en los próximos años. ¡La química de la fase gaseosa ciertamente lo merece!

---

<sup>2</sup> Los detalles de sus colaboraciones, tesis dirigidas y publicaciones se pueden leer en el número especial de J. Phys. Chem. A publicado recientemente en ocasión de su jubilación (J. Phys. Chem. A 122, 5679, 2018)