

# S. RAMÓN Y CAJAL, R. S. MULLIKEN, G. HERZBERG Y SUS TÓNICOS DE LA VOLUNTAD

*Juan Carlos del Valle*

*Departamento de Química Física Aplicada, Universidad Autónoma de Madrid*

## RESUMEN

Santiago Ramón y Cajal y su libro titulado “Reglas y consejos sobre investigación científica, los tónicos de la voluntad” nos servirá de plantilla para analizar la investigación de los Profesores Robert Mulliken y Gerhard Herzberg. Los tres investigadores pertenecen a generaciones muy distintas, pero sus tónicos de la voluntad, o como propongo renombrarlos, sus tónicos de la motivación, son muy parecidos. Aunque todos ellos siguen el método científico, también muestran importantes matices guiados siempre por una inmensa curiosidad y pasión al servicio de sus ideas. No hay lógica que guíe al descubrimiento, defienden los tres investigadores, y nos aconsejan con rotundidad que nos empleemos en la respuesta a preguntas esenciales, que depararan sin duda importantes utilidades, aunque con la idea clara de que “no hay cuestiones agotadas, sino hombres agotados en las cuestiones” –no es posible completar la respuesta a las preguntas que se plantearon, pero su trabajo fue sólido y aun se sigue recordando. Expreso, asimismo, un sentido homenaje en memoria del Profesor y amigo José Luis García de Paz (Química Física Aplicada, U.A.M.), quién también ejemplificó los tónicos de la voluntad de Cajal. Todos ellos pusieron en práctica la filiación, esponsalidad y fecundidad en la Universidad, y se guiaron por el amor a la verdad.

## INTRODUCCIÓN

Tanto Mulliken (1896-1986) y Herzberg (1904-1999) como Ramón y Cajal (1852-1934) fueron nominados y ganaron el premio Nobel en Química, los dos primeros, y en Medicina. Sus trabajos son estudiados aún hoy en día y su legado en gran parte se mantiene como ejemplo de excelencia investigadora y docente. ¿Qué tenían estos investigadores en común? ¿Qué elementos de su investigación o docencia está vigente y podría hoy en día enriquecernos? Ramón y Cajal escribió un libro que se ha hecho famoso, aún se sigue editando, cuyo título es “Reglas y consejos sobre investigación científica, los tónicos de la voluntad”.<sup>1</sup> Este libro nos servirá de guía para conocer el trabajo de los Profesores R. S. Mulliken y G. Herzberg. Los tres insignes investigadores tienen en común haber sido galardonados con el premio Nobel por el estudio de la estructura, bien de las moléculas o de las células nerviosas. Robert S. Mulliken<sup>2</sup> fue galardonado en 1966 por “*his fundamental work concerning chemical bonds and the electronic structure of molecules by the molecular orbital method*” (el estudio fundamental de los enlaces químicos y la estructura electrónica de las moléculas con la ayuda del método de orbitales moleculares). En 1971, Gerhard Herzberg<sup>3</sup> fue galardonado por “*his contributions to the knowledge of electronic structure and geometry of molecules, particularly free radicals*” (sus contribuciones al conocimiento de la estructura electrónica y la geometría de las moléculas, en concreto, los radicales libres”. El premio Nobel en Fisiología o Medicina lo recibió Santiago Ramón y Cajal<sup>4</sup> en 1906 “in recognition of their work on the structure of the nervous system” (en reconocimiento de su trabajo sobre la estructura del sistema nervioso), ex aequo con Camillo Golgi.

---

<sup>1</sup> Ramón y Cajal, S. (2008) Reglas y consejos sobre investigación científica, los tónicos de la voluntad. Reedición CSIC y Herederos de S. Ramón y Cajal. Cyan, Proyectos y Producciones Editoriales, S.A.

<sup>2</sup> [http://www.Nobelprize.org/Nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1966/](http://www.Nobelprize.org/Nobel_prizes/chemistry/laureates/1966/)

<sup>3</sup> [http://www.Nobelprize.org/Nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1971/](http://www.Nobelprize.org/Nobel_prizes/chemistry/laureates/1971/)

<sup>4</sup> [http://www.Nobelprize.org/Nobel\\_prizes/medicine/laureates/1906/cajal-facts.html](http://www.Nobelprize.org/Nobel_prizes/medicine/laureates/1906/cajal-facts.html)



Figura 1. De izquierda a derecha: S. Ramón y Cajal, G. Herzberg y R. S. Mulliken.

## **SOBRE SANTIAGO RAMÓN Y CAJAL**

Mucho se ha escrito de este prestigioso investigador español y se sigue escribiendo y citando su obra. Tuve un contacto especial con su obra sobre la fotografía por su libro titulado “Fotografía de los colores, bases científicas y reglas prácticas”. Además, la llamada “doctrina de la neurona” se encuentra ya en cualquier libro de texto de biología. Pero la reciente muerte de un amigo, José Luis García de Paz, Profesor titular de Química Teórica de nuestro departamento (Química Física Aplicada, U.A.M.), me llevó a encontrar entre sus libros personales un precioso legado que acabo de leer y estudiar, “Reglas y consejos sobre la investigación científica”. José Luis, ¡*qué descanses en paz amigo!* ¡Qué bonito regalo me has hecho! Este libro ha resultado ser un revulsivo emocional y práctico para mi docencia e investigación, especialmente por su rabiosa actualidad. Fue escrito a raíz de un discurso que el Profesor Cajal pronunció en 1897 para su ingreso en la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de Madrid. Desde entonces no ha parado de editarse no sólo en castellano sino también en alemán (1933), japonés (1958), húngaro, portugués e inglés (1951) y rumano (1967) hasta nuestros días –como referencia me he basado en la versión del CSIC de 2008, pero también existe una reciente en inglés editada por el Massachusetts Institute of Technology (MIT) de 1999.<sup>5</sup>

De las aptitudes del Profesor Cajal voy a señalar los siguientes puntos que me parecen significativos.<sup>6</sup> Era un estupendo dibujante como se ilustra en la Figura 2, un dibujo del corte axial de la retina; además de un innovador de la fotografía que aplicó a su campo de investigación, la histología. Era una persona disciplinada y con una voluntad férrea, de ideas claras y con vocación investigadora, de hecho se costeó su primer microscopio antes de acabar su doctorado y conseguir su plaza de ayudante. Fue un ejemplo de honestidad y de patriotismo, y como botón de muestra se indica lo siguiente: “Nombrado director del Laboratorio de Investigaciones Biológicas, el Gobierno le asignó un sueldo de diez mil pesetas anuales. Cajal pidió que se lo rebajaran a seis mil.” “Amemos a la patria, aunque no sea más que por sus merecidas desgracias”, afirmaba Cajal.<sup>7</sup> El Profesor Cajal relata que el patriotismo ardiente pero consciente y discursivo es una buena cualidad en el investigador. Fue una persona fecunda, tanto en lo personal, tuvo siete hijos, como en la profesional, publicó numerosos artículos científicos, libros y tuvo muchos discípulos a los que consideró su segunda familia. En su trabajo destaca la búsqueda de los nuevos hechos y su explicación deductiva, y la complementariedad entre ambos, pero los hechos son primero. Cajal destaca también el dominio de la técnica y la búsqueda de lo original como dos de las condiciones que debe tener un investigador.

<sup>5</sup> Santiago Ramón y Cajal. Advice for a Young Investigator. Translated by Neely Swanson and Larry W. Swanson. A Bradford Book, the MIT Press, Cambridge, Massachusetts, and London, England.

<sup>6</sup> [http://es.wikipedia.org/wiki/Santiago\\_Ram%C3%B3n\\_y\\_Cajal](http://es.wikipedia.org/wiki/Santiago_Ram%C3%B3n_y_Cajal)

<sup>7</sup> Santiago Ramón y Cajal Junquera. Ramón y Cajal, la voluntad de un sabio. Editorial *Just in Time*, S. L., 2006, p. 249.

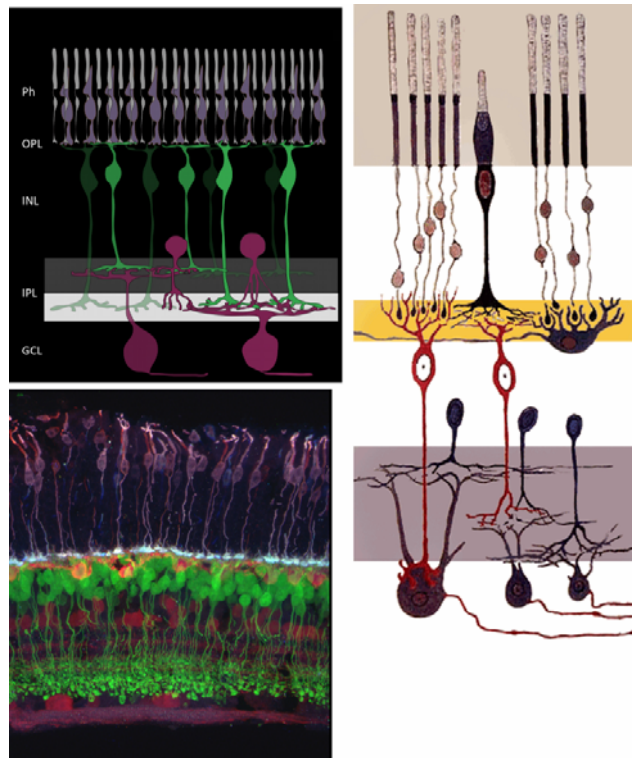


Figura 2. *Izquierda, arriba*: Dibujo de la sección vertical de la retina de un ratón. Ph: fotoreceptores (conos y bastones). OPL/IPL: Outer/Inner capa plexiforme externa/interna. INL: capa nuclear interna. GCL: capa de células ganglionares. *Izquierda abajo*: Sección vertical de la retina de un ratón. Imagen por Josh Morgan. Púrpura: Conos. Naranja: células horizontales. Verde: Células bipolares. Magenta: Células amacrinas + células ganglionares. La imagen fue recogida con la ayuda de microscopía confocal.<sup>8</sup> *Derecha*. Dibujo del corte axial de la retina de un vertebrado, por Cajal, publicado en su manual *Histologie du Système Nerveux de l'Homme et des Vertébrés*, en la edición francesa de 1911. Células bipolares de la retina en rojo, en la capa nuclear interna; las células bipolares están conectadas a los fotoreceptores (bastones, parte superior) y a las células ganglionares y amacrinas (parte inferior), o a células horizontales. En nada tiene que envidiar la ilustración de Cajal a las ilustraciones obtenidas con la ayuda de microscopía de fluorescencia confocal.

El Profesor Larry S. Swanson<sup>5</sup> defiende los logros conseguidos por el Prof. Cajal en la reciente edición inglesa “Advice for a young investigator”, de cuyo prefacio traduzco y extraigo lo siguiente: Cajal presentó evidencias histológicas de que el cerebro está formado por neuronas individuales que generalmente conducen información en una dirección... Cajal descubrió la sinapsis y la organización de los sistemas neuronales mayores en términos de cadenas de neuronas independientes (Figura 2, derecha) y el concepto de polaridad funcional (flujo de información unidireccional en circuitos). Fue el primero en explicar en términos modernos la organización de los caminos de control reflejo y voluntario hacia el sistema motor.

### **Sobre el paradigma científico del Profesor Ramón y Cajal.**

El libro “Reglas y consejos sobre investigación científica” está dirigido al joven investigador. Sin embargo, el paradigma científico que contiene puede ser dirigido a cualquier investigador joven o senior. Cajal defiende la actividad investigadora como una actividad integral en la que debe posarse o basarse la vida del investigador cuyo empeño debe ser la búsqueda de la verdad propia de la persona humana. Asimismo destaca tres elementos de la vocación científica, la filiación, la esponsalidad y la

<sup>8</sup> J.L. Morgan, A. Dhingra, N. Vardi, R. O. L. Wong. Axons and dendrites originate from neuroepithelial-like processes of retinal bipolar cells. *Nature Neuroscience* 2005, 9, 85-92. <http://wonglab.biostr.washington.edu/gallery.html#target20>.

fecundidad,<sup>9</sup> que el joven investigador debe procurar con trabajo duro y voluntad. La palabra voluntad se destaca no sólo en el título sino en el contenido del libro como una de las características importantes que debe poseer todo investigador. Esos tres elementos se trazan en el libro desde la perspectiva del amor; el amor por la verdad, el amor por la sociedad en la que se vive y a la que se debe. La filiación hace referencia a la dependencia que tiene el científico con la sociedad en la que vive, la sociedad española. A la filiación, Cajal la denomina patriotismo, amor a la patria, y la matiza de esta forma singular: “Patriotismo ardiente, pero consciente y discursivo: lejos de candorosos optimismos de ciertos patriotas, o, mejor dicho, patrioterros, que con pronunciar cuatro o cinco nombres prestigiosos indígenas creen haber demostrado la colaboración decisiva de su país en la obra de la cultura nacional,...”. La sponsalidad, por estar llamado a compartir la vida con otras personas; yo he recibido y debo dar a los demás, qué también va conectado con el patriotismo anteriormente mencionado. La sponsalidad también se entiende y se procura en aras de la fecundidad, como autor de trabajos científicos, libros y otros, y también como maestro, en favor de la formación investigadora de jóvenes, a los que insta a la verdadera vocación científica: “La verdadera vocación consiste siempre en esa actividad especial a que el joven, menospreciando distracciones de la edad, sacrifica tiempo y peculio”. Se pregunta Cajal, ¿Cómo se crea la vocación irresistible hacia la Ciencia? Y eso mismo nos preguntamos todos los profesores aún hoy observando a nuestros alumnos, en apariencia altamente desmotivados para buscar la verdad con las herramientas científicas. Ramón y Cajal incide sobre un tema muy de actualidad que es la motivación,<sup>10</sup> aunque es una palabra que no utiliza en su libro sobre consejos. La vocación irresistible hacia la ciencia es una decisión personal, pero que uno debe probar, por ejemplo, por el empleo de un método analítico que pase por incierto y difícil hasta que, a fuerza de paciencia y trabajo, se obtengan los resultados mencionados por los autores.

**El paradigma.** El paradigma de Cajal se podría caracterizar por la negación de todo paradigma. El Profesor Cajal afirma entre sus tónicos de la voluntad: “Importa consignar que los descubrimientos más brillantes se han debido, no al conocimiento de la lógica escrita, sino a esa lógica viva que el hombre posee en su espíritu, con la cual labora ideas con la misma perfecta inconsciencia con que Jourdain hacía prosa.”<sup>11</sup>

Por tanto, Cajal defiende: i) Que no hay conocimiento de la lógica escrita que nos pueda llevar a hacer un descubrimiento; ii) Qué la voluntad es educable, así como la inteligencia; iii) El científico necesita del lenguaje apropiado para progresar; iv) Para ser científico se necesitan cualidades subjetivas así como objetivas, y por tanto, Cajal responde a la siguiente pregunta, ¿cómo debe ser uno para convertirse en un buen investigador científico?; v) El dominio del método (observación, experimentación y razonamiento inductivo y deductivo) es fundamental; vi) El saber, en contra de la opinión popular, si ocupa lugar, el científico debe suprimir las distracciones y concentrarse en lo importante; vii) El talento de un científico puede ser lento o rápido, pero todo aquel que cultiva la voluntad llega a la meta con trabajo duro (“el trabajo crea el talento”); viii) El azar también cuenta en todo descubrimiento, pero este llega a aquel que se lo merece por trabajo duro, aplicación del método correcto y voluntad, y no al que simplemente lo desea. Los consejos de Cajal son parte de su paradigma y van dirigidos a educar la voluntad.

### **Algunos de los tónicos de la voluntad de Cajal.**

i. *Método.* Practicar el método correcto, teniendo en cuenta que no hay en realidad un método, que no hay una lógica que nos lleve sistemáticamente al descubrimiento o a la explicación del descubrimiento. El investigador debe seguir el sentido común y la reflexión basados en la observación,

---

<sup>9</sup> Esta clasificación se entiende del libro escrito por el Profesor Cajal, y además, los términos *filiación* y *sponsalidad* se extrajeron de la charla que imparte anualmente la Profesora María José Lucíañez Sánchez (Dept. Zoología, U.A.M.) con el título ¿Qué pinto yo en la Universidad? (Dirigida a jóvenes investigadores y estudiantes.)

<sup>10</sup> V. Fuster, E. Reverte. El Círculo de la Motivación. Editorial Planeta. 2013.

<sup>11</sup> Jourdain, protagonista de la obra El burgués Gentilhombre escrita por Molière, quien se expresaba en prosa sin saberlo.

experimentación y razonamiento inductivo y/o deductivo. El sentido común nos lleva a la trascendencia científica -a la satisfacción, a la autoestima.

ii. *Génesis. Transmitir la génesis del descubrimiento.* Exponer al observador la génesis de cada invención científica, la serie de errores y titubeos que la precedieron, constitutivos, desde el punto de vista humano, de la verdadera explicación de cada descubrimiento.

iii. *Funcionalidad. Quedarnos con lo que funciona.* Eliminar las falsas teorías, crecer un poco a costa de la reputación de las mismas. Demostrar la falsedad de una concepción y refutarla con nuevas investigaciones.

iv. *El conocimiento científico es ilimitado.* “No hay cuestiones agotadas, sino hombres agotados en las cuestiones. Tan fragmentario es nuestro saber, que aun en los temas más prolijamente explorados surgen a lo mejor insólitos hallazgos.”

v. *Indivisibilidad. No dividir la ciencia. La falsa distinción entre ciencia teórica y ciencia práctica.* Es absurdo formar dos grupos entre los científicos: los que pierden el tiempo en especulaciones de ciencia pura y estéril y los que saben hallar hechos de aplicación inmediata al aumento y comodidad de la vida. Donde los principios o hechos son descubiertos brotan las aplicaciones a corto o a largo plazo.

vi. *La voluntad: Firmeza y arraigo en el hecho científico.* Cajal pone énfasis en la voluntad, un enérgico querer, como herramienta para el descubrimiento científico. El descubrimiento de algo no es fruto de ningún talento originariamente especial, sino del sentido común mejorado y robustecido por la educación técnica y por el hábito de meditar sobre los problemas científicos.

vii. *Trabajo y atención, reflexión.* Las deficiencias de la aptitud propia son compensables mediante un exceso de trabajo y de atención. Cabría afirmar que el trabajo sustituye al talento, o mejor dicho, “*crea el talento.*”

viii. *Concentración. El saber ocupa lugar, diga lo que diga la sabiduría popular.* “Si, a despecho de los esfuerzos hechos por mejorarla, nuestra memoria es inconstante y poco tenaz, administrémosla bien. Desechemos las ocupaciones innecesarias, y esas ideas parásitas tocantes a las menudencias fútiles de la vida, y fijemos tan sólo en la mente, a favor de una atención ahincada y persistente, los datos relativos al problema que nos ocupa.”

ix. *Actitudes. Qué persona debo ser.* Las cualidades de orden moral que debe poseer el investigador: a) Independencia de juicio, b) perseverancia en el estudio, c) pasión por la gloria, d) patriotismo, e) gusto por la originalidad científica.

x. *Aptitudes. Lo que debe saber el investigador:* a) cultura general, b) necesidad de especializarse, c) lectura especial o técnica, d) cómo se deben estudiar las monografías, e) la necesidad absoluta de buscar la inspiración en la naturaleza, f) el dominio de los métodos, y g) en busca del hecho nuevo.

xi. *Intercambio de ideas.* Cajal remarca la importancia de viajar a otros países e intercambiar impresiones, dialogar sobre la labor investigadora; la ciencia, sentencia Cajal, como todas las actividades específicas del entendimiento, es simple consecuencia de la imitación y del ejemplo. La ciencia nace del contacto entre civilizaciones diferentes.

**En síntesis.** Los tónicos de la voluntad son la solución del investigador a la pasividad y la frustración, en aras de estar motivado y satisfecho con su trabajo. La satisfacción está unida a la sensatez y el amor por la verdad. De hecho, los consejos de Cajal publicados en 1897 muestran una

gran similitud con el “Círculo de la Motivación”, recientemente publicado por Valentín Fuster y Emma Reverte en 2013.<sup>12</sup> Santiago Ramón y Cajal nos invita a elegir nuestra vocación, a dar lo mejor de nosotros mismos a la sociedad en la que vivimos (patriotismo), nos invita a trabajar duro, de forma discursiva, con amor a la verdad y fecundidad; es decir, el investigador está llamado a compartir sus conocimientos con otros, a formar a otros investigadores. Todo esto, filiación, esponsalidad y fecundidad nos hace maduros y nos proporciona autoestima –son la base de la motivación y satisfacción que nos habla el Profesor Fuster. El investigador debe reflexionar de acuerdo al método científico, debe trabajar duro, lo que crea talento, transmite positividad, no se involucra en tareas que puedan enfermar la voluntad del científico (como la contemplación, hablar por hablar, el gasto inútil del tiempo, etc.), el investigador debe estar educándose de forma que adquiera una cultura general, pero también específica y adaptada a la tarea concreta de investigación. Por otra parte, el investigador tiene que amar la verdad, saber transmitir sus conocimientos a los estudiantes, aprovechar los momentos de crisis para saber aceptar la crítica constructiva y fortalecer su voluntad, uno debe ser auténtico y también altruista. Esto último lo conecta íntimamente con el patriotismo sensato y discursivo de Cajal. Los momentos de dificultades tanto nacionales (Cajal vivió unos momentos difíciles de la sociedad española como la guerra de los diez años en Cuba (1873-1874) y la crisis de 1898) como personales (por la dificultad para que su labor científica fuera reconocida internacionalmente) hicieron que Cajal desarrollara una fuerte voluntad, y con trabajo duro las fue superando. Implícitamente, Cajal nos está mostrando la motivación, satisfacción, que vienen por el cultivo de la voluntad, y la pasividad y la frustración que devienen con las enfermedades de la voluntad, que debemos suprimir o evitar.

## **SOBRE R. S. MULLIKEN.**

**Quién era y qué descubrió.** Robert Mulliken fue un investigador y docente universitario que siguió el método científico y cumplió con algunos de los tónicos de la voluntad que se enuncian anteriormente. Se caracterizó por su conocimiento experimental en el campo de la espectroscopia, y por la complementariedad de este con el conocimiento teórico, en el campo de la química cuántica. De hecho, dirigió dos laboratorios, uno sobre espectroscopia experimental y otro sobre química teórica en la Universidad de Chicago. Utilizó las matemáticas como modelo descriptivo, dentro del marco de la química cuántica, más que el análisis deductivo.<sup>13</sup> En esto se distingue claramente de Cajal, quién buscaba el hecho nuevo y después utilizaba un análisis deductivo. Camillo Golgi tuvo una importancia decisiva en las observaciones de Cajal por la técnica de tinción que empleaba, asimismo, F. Hund<sup>14</sup> tuvo aportaciones decisivas al entendimiento de R. S. Mulliken sobre la estructura molecular. Ambos, Hund y Mulliken se consideran junto a E. Hückel los padres de la teoría de orbitales moleculares. Sin embargo, Hund y Mulliken nunca publicaron nada juntos, tuvieron muchos diálogos científicos tanto en Estados Unidos como en Alemania pero ambos buscaron la independencia de juicio, la perseverancia en el estudio, el patriotismo sensato y discursivo y el gusto por la originalidad científica. De la interacción entre Mulliken y Hund, y otros investigadores como Herzberg se desarrolló la espectroscopia molecular. A Herzberg, científico alemán y canadiense, se le atribuye la explicación correcta del enlace químico con electrones de enlace y anti-enlace. Esta interacción entre personalidades de diferentes nacionalidades como Mulliken, Hund y Herzberg con un especial amor por la verdad y el querer enérgico por entender la química cuántica, disciplina ya creada por Heitler, London y Pauling, les llevo a hacer importantes y originales aportaciones.

Entre sus aportaciones, Mulliken sistematizó y exploró los espectros moleculares asignando números cuánticos a los electrones individuales. Los diagramas de correlación se desarrollaron desde los principios de Hund para interpolar los estados electrónicos de una molécula diatómica entre dos

---

<sup>12</sup> Valentín Fuster. <http://youtu.be/L0wcmWz6gqk>

<sup>13</sup> M. Kasha. Four great personalities of science: G. N. Lewis, J. Franck, R.S. Mulliken and A. Szent-Györgyi. *Pure and Appl. Chem.* 1990, 62, 1615.

<sup>14</sup> F. Hund. *Recollections of R. S. Mulliken.* First annual Mulliken memorial lecture at the University of Chicago, 1988.

situaciones límite, con los dos átomos separados y con los dos núcleos unidos, y la teoría del electrón promocionado de Mulliken.<sup>15</sup>

La regla de Mulliken y Rieke<sup>16</sup> fue enunciada en 1941 desde los espectros de absorción de polienos. Esta regla establece que la fuerza de oscilador de una transición electrónica no cambia con la temperatura. Esta regla implicaba que el espectro de absorción para una transición electrónica en una molécula poseía un área que no cambiaría con la temperatura, a menos que cambiara la conformación molecular con la temperatura, por ejemplo, por medio de una vibración torsional de los enlaces, en cuyo caso la regla no se cumpliría,<sup>17</sup> y el área de absorción cambiaría.

En opinión de Mulliken, el premio Nobel fue principalmente concedido por una serie de catorce trabajos publicados en la revista *The Journal of Chemical Physics* con el título de “Electronic Structures of Polyatomic Molecules and Valence” (estructuras electrónicas de moléculas poliatómicas y valencia); trabajo que realizó entre los años 1931 y 1935.<sup>18</sup>

### Sus tónicos de la voluntad.

i. *Método*. “If there ever was a scientist who could sit down with a blank piece of paper and think new science, it was Robert Mulliken” –así es como Michael Kasha<sup>13</sup> describe a Mulliken (Si alguna vez hubo un científico que pudiera sentarse con un pedazo de papel en blanco y pensar en la nueva ciencia, ese fue Mulliken). Por las declaraciones del Prof. Kasha y desde la autobiografía publicada por el mismo Mulliken, se puede concluir que utilizaba un razonamiento no deductivo. Su trabajo inicial puramente experimental le llevó a tener una gran intuición química, que le llevaba con el dominio de la técnica a obtener hipótesis que después se verificaban con resultados, con medidas. Utilizaba las matemáticas para conceptualizar o describir, y no para calcular o para extraer razonamientos deductivos. Un ejemplo de esta conceptualización es el análisis de población de Mulliken,<sup>19</sup> que se sigue utilizando con resultados razonables –este análisis permite estimar la población electrónica de cada átomo en una molécula y su carga parcial.

ii. *Génesis*. Transmitir la génesis del descubrimiento. Mulliken no estuvo especialmente interesado en la transmisión del conocimiento científico de una forma didáctica. Sus artículos son meticulosos, cada palabra tiene un sentido especial que dominaba, lo que hace que a la vez sea complicado. La regla de Mulliken-Rieke sobre la constancia del área del espectro de absorción con la temperatura aparece perfectamente documentada, incluso en qué casos no se cumpliría, por ejemplo, por el cambio de la estructura química de la molécula por una vibración torsional con la temperatura. No se preparaba adecuadamente las conferencias, las charlas, que poseían un estilo poco apreciado por la audiencia. El conocimiento de la materia era tan soberbio para Mulliken, que pensaba que no era necesaria preparación alguna para comunicarlo. Cómo comunicar de forma didáctica o efectiva lo que sabía no era importante para Mulliken. Esto produjo sin duda un claro retraso en la aceptación de sus ideas y resultados, especialmente la aceptación de la teoría de orbitales moleculares.

iii. *Funcionalidad*. Quedarnos con lo que funciona. Mulliken dedicó su trabajo a aclarar la teoría de enlace de valencia (TEV) propuesta por Heitler-London-Pauling y a proponer otra que funcionaba mejor, la teoría de orbitales moleculares (TOM), elaborada con F. Hund, pero independientemente. Ambas teorías TEV y TOM llevan al mismo resultado de energía si se elaboran en las condiciones adecuadas, pero la teoría de orbitales moleculares es más funcional, y por eso se ha impuesto con el tiempo –el tiempo de cálculo es más corto, la construcción de la función de onda es

<sup>15</sup> Robert S. Mulliken. The Assignment of Quantum Numbers for Electrons in Molecules. I. *Phys. Rev.* 1928, 32, 186.

<sup>16</sup> R. S. Mulliken, C.A. Rieke. *Phys. Soc. London, Prog. Phys.* 1941, 8, 231.

<sup>17</sup> R. S. Mulliken. *J. Chem. Phys.* 1939, 7, 14.

<sup>18</sup> R. S. Mulliken. *Life of a Scientist*. Editorial Springer-Verlag, 1989.

<sup>19</sup> R. S. Mulliken. "Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. I". *The Journal of Chemical Physics* 1955, 23 (10), 1833.

más sencilla, y la obtención de información física y química es más directa que con la teoría de enlace de valencia, por ejemplo, la densidad electrónica, potenciales de ionización, propiedades magnéticas, etc. Mulliken, además, no tenía reparos en informar de sus errores, o en reconocer los aciertos de otros colegas.

iv. *El conocimiento científico es ilimitado.* Mulliken no se conformó con la teoría de enlace de valencia propuesta por Heitler-London-Pauling, si no que fue más allá en su afán por interpretarla. De esa interpretación y reflexión surgió una nueva formulación de la teoría, la teoría de orbitales moleculares.

v. *No dividir la ciencia.* La falsa distinción entre ciencia teórica y ciencia práctica. Donde los principios o hechos son descubiertos brotan las aplicaciones a corto o a largo plazo. El mérito de Mulliken fue demostrar que de los resultados de interpretar la teoría de orbitales moleculares se podría obtener información valiosa de cargas atómicas, de cambios conformacionales y transiciones electrónicas –por la interpretación de los espectros con TOM. Esta validación animó a otros, como John Pople y Walter Kohn, a elaborar y programar la teoría dando lugar al programa Gaussian y a la teoría del funcional de densidad, respectivamente, que han podido ser difundidos y comercializados con éxito para el beneficio de otros científicos. Los resultados de Gaussian se utilizan para deducir por ejemplo mecanismos de reacción que expliquen los resultados experimentales. De hecho, gracias a la elaboración de Gaussian y de la teoría del funcional de densidad, Pople y Kohn lograron el premio Nobel de Química en 1998. Mulliken llegó a la conceptualización e interpretación de la teoría de orbitales moleculares por sus conocimientos experimentales en el campo de la física, y de ahí abordó el problema de los espectros en moléculas orgánicas, por lo que recibió el premio Nobel de Química. Lo importante para Mulliken no era si el acercamiento era químico o físico, experimental o teórico, lo importante era el hecho científico y su interpretación científica lo más meticulosa posible. Los conocimientos de Mulliken sobre los espectros fueron fundamentales, pero otros supieron desarrollarlos para obtener un beneficio, una aplicación comercial (investigación + desarrollo + innovación).

vi. *La voluntad.* Firmeza y arraigo en el hecho científico. Los estudios de Mulliken sobre la separación de isótopos de mercurio bajo la supervisión del Profesor William D. Harkins, en la Universidad de Chicago, o sus trabajos sobre química orgánica con el Profesor James F. Norris (combinando alcoholes con ácidos de halógenos para conseguir los bromuros y cloruros correspondientes),<sup>20</sup> en el MIT -Massachusetts Institute of Technology- contribuyeron a su autoestima y ese enérgico querer entender la naturaleza. El joven Mulliken estuvo trabajando con algunos de los mejores químicos de esa época. Los trabajos isotópicos del mercurio le llevaron a estudiar los efectos isotópicos en los espectros moleculares. De modo, que los hechos experimentales y la lectura de los artículos sobre la teoría de valencia trabajada por G. N. Lewis le llevaron al entendimiento más profundo de los espectros de moléculas poliatómicas con la teoría de orbitales moleculares.

vii. *Trabajo y atención, reflexión.* El trabajo y la atención fueron sus principales características. La complementariedad de teoría y experimento fue una constante en su carrera, y por ende, en 1946 el grupo de investigación de Mulliken dividió su tiempo entre el trabajo teórico y el experimental, este realizado en su laboratorio de Estructura Molecular y Espectros.<sup>21</sup> En este laboratorio trabajaron Charles Price, H. Christopher Longuet-Higgins, Michael Kasha, Klaus Ruedenberg, Robert Parr, Gerhard Herzberg, Enrico Clementi, Serafín Fraga y otros. Robert Mulliken se planteó una pregunta en el discurso de su graduación en high-school (equivalente al bachillerato español) “What are the electrons really doing in molecules?” (¿Qué hacen realmente los electrones en las moléculas?) Y

---

<sup>20</sup> J.F. Norris, R.S. Mulliken. Reaction between alcohols and aqueous solutions of hydrochloric and hydrobromic acids. II. J. Am.Chem. Soc, 1920, 42, 2093.

<sup>21</sup> David L. Adams. “Robert S. Mulliken: What are the Electrons Really Doing in Molecules?” 2000. [www.chem.umass.edu/~adams/pubs/mullikenweb.pdf](http://www.chem.umass.edu/~adams/pubs/mullikenweb.pdf)



Mulliken, con trabajo, atención y reflexión dedicó toda su vida a contestar esa pregunta. Aún hoy muchos otros se hacen la misma pregunta, como defendía Ramón y Cajal, las preguntas nunca se agotan, son los científicos los que se agotan. Como botón de muestra, el Profesor Fernando Martín y otros<sup>22</sup> han publicado un trabajo reciente en Science sobre el movimiento de los electrones en una molécula con interés biológico (dinámica electrónica a escala de attosegundos,  $10^{-18}$  segundos), el aminoácido fenilalanina.

viii. *Concentración*. El saber ocupa lugar, diga lo que diga la sabiduría popular. Mulliken debió llegar a esta conclusión desde su educación temprana guiado por una gran pasión al servicio de una gran idea, responder a la pregunta ¿qué hacen los electrones en las moléculas? Su vida profesional se entregó a responder esa pregunta y a poner todos los medios a su alcance que le hicieran concentrarse en ese tema. De su autobiografía se deduce que Mulliken se concentró principalmente en su trabajo científico, sus colaboradores científicos y su familia.

ix. *Actitudes*. Qué persona debo ser. a) Independencia de juicio, b) perseverancia en el estudio, c) pasión al servicio de una gran idea, d) patriotismo, e) gusto por la originalidad científica. De la lectura de su autobiografía se deducen todas las actitudes que figuran en la lista de Cajal. El patriotismo, quizás una palabra conflictiva, pero bien entendido, con sensatez y reflexión, se podría decir que Mulliken siguió la misma idea sobre el patriotismo que Ramón y Cajal. Asimismo, al igual que Cajal participó en la llamada guerra de los diez años en Cuba como médico, Mulliken se unió al Chemical Warfare Service (CWS) de Estados Unidos, donde trabajó con gases venenosos en la American University en Washington, DC, bajo la dirección de James B. Conant de Harvard University. En 1918, Mulliken fue hospitalizado durante seis meses por quemaduras de gas de mostaza debido a un accidente en el laboratorio. Después contrajo influenza y posteriormente en 1919 le dieron de baja de la armada de Estados Unidos. También trabajó en el proyecto Manhattan (el proyecto de la bomba atómica) desde 1942 hasta 1945 como director de la división de información, perteneciente a la división de química.

x. *Aptitudes*. Lo que debe saber el investigador: a) cultura general, b) necesidad de especializarse, c) lectura especial o técnica, e) la necesidad absoluta de buscar la inspiración en la naturaleza, f) el dominio de los métodos, y g) en busca del hecho nuevo. Mulliken ejemplificó al científico que buscó el hecho nuevo con sus experimentos en espectroscopia y puso el dominio de la técnica al servicio de encontrar la explicación más adecuada para esos hechos. Como ejemplo, en los años 60, comenzó a utilizar ordenadores para acortar el tiempo de cálculo; esto le permitió predecir propiedades químicas y físicas de moléculas por aplicación de la combinación lineal de orbitales atómicos y la aproximación de campo autoconsistente. Esto le llevó a interactuar con el investigador español Serafín Fraga (doctor honoris causa en 2006 de la Universidad Autónoma de Madrid), quien en 1958 comenzó una estancia postdoctoral en su grupo de investigación y colaboró entre otras cosas en el estudio de la energía de coulomb en la teoría del enlace de valencia.<sup>18</sup>

xi. *Intercambio de ideas*. También Mulliken consideró la importancia de viajar para dialogar con otros científicos que trabajaban en su mismo ámbito.<sup>18</sup> Importantes para su entendimiento fueron los viajes que realizó en 1925, cuando visitó a las figuras de su campo de trabajo más eminentes, como Wilfred Jevon, Lord Rayleigh, James Franck, Neils Bohr, Friedrich Hund (que era ayudante de Max Born) y Hermann Mark. Precisamente con Hund estableció una estrecha colaboración de trabajo, claramente independiente, que les llevó a elaborar la teoría de orbitales moleculares, también llamada teoría de Mulliken-Hund (Figura 3). Hund también fue reconocido por enunciar la regla de máxima multiplicidad y por descubrir el efecto túnel en química cuántica. Mulliken pasó la primavera de 1930 en Leipzig con Werner Heisenberg, Friedrich Hund, y Peter Debye trabajando en los espectros

---

<sup>22</sup> F. Calegari, D. Ayuso, A. Trabatonni, L. Belshaw, S. De Camillis, S. Anumula, F. Frassetto, A. Palacios, P. Decleva, J. B. Greenwood, F. Martín, M. Nisoli. Ultrafast electron dynamics in phenylalanine initiated by attosecond pulses. Science 346, 336-339 (2014)

moleculares de los halógenos. En 1932 viajó por toda Europa visitando a los científicos más destacados en espectroscopia molecular, entre ellos se entrevistó con Gerhard Herzberg, quién ya era conocido por sus ideas en la estructura electrónica de las moléculas diatómicas. Herzberg y Mulliken establecieron una estrecha amistad y colaboración científica –aunque de forma independiente, no llegaron a publicar juntos. Mulliken llegó a proponer a su departamento de física de la Universidad de Chicago que contratara a Herzberg, pero su idea tuvo la oposición firme de algunos colegas, y finalmente Herzberg desarrolló un instituto de espectroscopia en Ottawa, con especial énfasis en astrofísica.



Figura 3. Robert Mulliken (arriba) y Friedrich Hund, Chicago 1929.

### SOBRE G. HERZBERG.

**Quién era y qué descubrió.** "You shouldn't do science just to improve wealth — do science for the sake of human culture and knowledge. There must be some purpose in life that is higher than just surviving."<sup>23</sup> El Profesor Herzberg con estas palabras sintetiza el deseo de un hombre que busca el descubrimiento y su entendimiento no sólo para objetivos pequeños, si no con fines altruistas, en aras de la cultura humana y su conocimiento. Herzberg se formó con los mejores maestros de su época, todos ellos pioneros de la mecánica cuántica, pero al igual que Cajal y Mulliken le caracteriza su pasión por la gloria, su independencia de pensamiento, su voluntad férrea, su amor por la verdad... Cuando tenía doce años construyó su primer telescopio. Tuvo una formación tanto experimental como teórica en espectroscopia molecular y mecánica cuántica. Se inició en la mecánica cuántica a raíz de leer un artículo escrito por E. Schrödinger titulado "Quantization as an eigenvalue problem". Sus estudios para obtener el grado de Doctor Ingeniero fueron dirigidos por Hans Rau. En la defensa del grado habló sobre los espectros moleculares del  $N_2$  y el  $N_2^+$ . Su trabajo experimental se vio completado con sus trabajos teóricos en el Instituto de Teoría Física dirigido por Max Born y con su trabajo experimental en espectros de absorción molecular en el ultravioleta lejano en el Segundo Instituto de Física Experimental de James Franck. La complementariedad entre teoría y experimento combinado con la interacción con físicos y matemáticos alemanes pioneros de la mecánica cuántica le llevó a obtener una sólida formación en espectroscopia molecular. Colaboró con H. Heitler, fundador de la Teoría de Enlace de Valencia, publicó sobre la Teoría de Orbitales Moleculares iniciada por F.

<sup>23</sup> Science.ca; <http://www.science.ca/scientists/scientistprofile.php?pid=8&pg=0>

Hund y R. Mulliken, y más tarde colaboró con J. E. Lennard-Jones. Herzberg vivió en una época de dificultades bélicas y racistas. Casado con Luise Oettinger, de origen judío, también espectroscopista con la que colaboró en algunos de sus trabajos, tuvo que huir del régimen Nazi, al igual que se exiliaban algunos de sus colaboradores y estudiantes de doctorado. Finalmente se afincó en Canadá, donde aceptó una posición en el National Research Council en Ottawa como director de física desde 1949 hasta 1969, donde consiguió la mayoría de los descubrimientos que le valieron para conseguir el premio Nobel de Química en 1971. En ese mismo instituto siguió como investigador distinguido hasta su muerte en 1999. Herzberg fue un físico cuyos descubrimientos fueron muy importantes para la Química porque aportó información determinante de la geometría interna y los estados de energía de las moléculas. Algunos de sus logros científicos son los siguientes:

- En 1929, durante su estancia en el Instituto dirigido por M. Born, explica el enlace químico a nivel electrónico.
- En 1941 registró el espectro del ión  $\text{CH}^+$  en nubes interestelares, probando así que ese ion existía en el espacio.<sup>24</sup>
- En 1948, demostró que el  $\text{H}_2$  existe en atmósferas planetarias.
- En 1956, obtuvo el espectro del radical metilo  $\text{CH}_3$ .<sup>25</sup>
- En 1959, publicó el espectro del radical metileno  $\text{CH}_2$ .<sup>26</sup>

Los radicales libres son moléculas muy inestables cuya vida dura microsegundos ( $10^{-6}$  segundos), su descubrimiento aportó información sobre la estructura interna y estados de energía que predecía la teoría de orbitales moleculares definida por Mulliken y Hund. Los tres ilustres investigadores, Hund, Mulliken y Herzberg mostraron que la teoría de orbitales moleculares proporcionaba una descripción más apropiada de la espectroscopia (Figura 4), la ionización y las propiedades magnéticas de las moléculas.

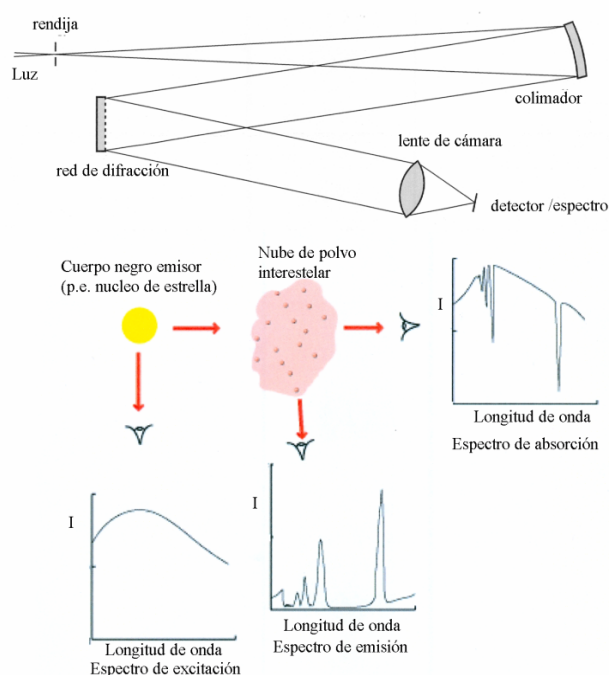


Figura 4. Esquema general de un espectrómetro (arriba). Modos de detección con la ayuda de un espectrómetro (abajo): absorción, emisión y excitación.

<sup>24</sup> A.E. Douglas, G. Herzberg. 1941, ApJ, 94, 381.

<sup>25</sup> G. Herzberg, J. Shoosmith. Absorption spectrum of free  $\text{CH}_3$  and  $\text{CD}_3$  radicals, *Can. J. Phys.*, 1956, 34, 523.

<sup>26</sup> G. Herzberg and J. Shoosmith. *Nature* (London), 1959, 183, 1801; G. Herzberg, G., The Bakerian Lecture. The Spectra and Structures of Free Methyl and Free Methylene, *Proc. Roy. Soc. (London)* A262, 1961, 262, 1310, 291.

## Sus tónicos de la voluntad.

i. *Método*. Sobre su método de investigar el mismo Herzberg comentó lo siguiente en 1984:<sup>27</sup> "In a good sense, I am like a beaver ... I don't have all that many problems which are brilliant but if it is a problem I think is important I persist in it." (En el buen sentido, soy como un castor ... No tengo todo lo que muchos problemas que son brillantes, pero si se trata de un problema que creo que es importante, persisto sobre el mismo.) Herzberg fue un investigador principalmente experimental, registró espectros de moléculas altamente reactivas y con vidas muy cortas, y de estos espectros dedujo información valiosa sobre la estructura de esas moléculas y sus estados de energía. Se basó en los hechos, y aplicó un método deductivo. La interpretación teórica de los espectros con la ayuda de la mecánica cuántica siguió a sus descubrimientos científicos. La investigación científica debe estar guiada por la curiosidad y por el arduo trabajo en aras del conocimiento y de la cultura, pero no por conseguir una utilidad, la utilidad defendía Herzberg se hará evidente cuando llega el descubrimiento, bien a corto o largo plazo. Se convirtió en líder de un grupo de científicos en protesta contra el gobierno de Canadá que pretendía un control sobre la ciencia y enfatizaba la investigación dirigida a la industria –Herzberg contradujo esa posición y defendió hasta el final de sus días que la búsqueda de lo esencial era lo más importante, y de lo que se sacaría siempre utilidad.<sup>27</sup>

ii. *Génesis*. Transmitir la génesis del descubrimiento. Herzberg manifiesta haber tenido grandes maestros y mentores, como Hans Rau, su director de tesis en Darmstadt. Rau inspiró a Herzberg a encontrar su propio tema de trabajo y apoyó sus primeros estudios sobre espectroscopia molecular y posteriormente le mandó a visitar a Schrödinger, uno de los pioneros de la mecánica cuántica.

iii. *Funcionalidad*. Quedarnos con lo que funciona. Al igual que Mulliken, Herzberg trabajó con Heitler en el desarrollo de la teoría de enlace de valencia, pero se decantó por la teoría de orbitales moleculares porque describía mejor las geometrías de las moléculas, la ionización y sus propiedades magnéticas.

iv. *El conocimiento científico es ilimitado*. Herzberg tenía muy claro este punto, puesto que vivió en una época de grandes cambios debido al despertar de la mecánica cuántica y de la espectroscopia molecular. Cuando se graduó en la universidad no se sabía cómo los átomos se combinaban para formar moléculas, muy poco se había probado. Herzberg contribuyó con sus ideas y experimentos a demostrar cómo los átomos y moléculas absorben o emiten luz (Figura 4). Midiendo los espectros fue capaz de describir los niveles de energía, la localización más probable de los electrones, etc. Herzberg empleó más de dieciocho años en determinar la naturaleza de los estados electrónicos del radical metileno, sin embargo, las preguntas no se agotan, aún hoy permanecen muchas incógnitas sobre este radical, que se sigue estudiando con nuevas técnicas experimentales.<sup>28</sup>

v. *No dividir la ciencia*. La falsa distinción entre ciencia teórica y ciencia práctica. Donde los principios o hechos son descubiertos brotan las aplicaciones a corto o a largo plazo. Herzberg, al igual que Cajal, dedicó parte de sus últimos años de vida a recordar a la gente que no se debe hacer ciencia con el propósito de hacer sólo algo útil.<sup>29</sup> "That's not why I did it," Herzberg comentaba. "Scientists wonder how certain things work, so they try more and more to find out how and why. Whether or not their work will lead to something useful, they don't care, because they don't know, and for that matter, they're not that interested. If you develop science only with the idea to do something useful, then your chances of discovering something useful are less than if you apply your mind to finding something

<sup>27</sup> <http://biography.yourdictionary.com/gerhard-herzberg>

<sup>28</sup> S. Brünken, E.A. Michael, F. Lewen, Th. Giesen, H. Ozeki, G. Winnewisser, P. Jensen, E. Herbst. High resolution terahertz spectrum of CH<sub>2</sub> –low J rotational transitions near 2 THz. Can. J. Chem. 2004, 82, 676.

<sup>29</sup> <http://www.science.ca/scientists/scientistprofile.php?PID=8&pg=1>

essential.”<sup>30</sup> En esto coincidía totalmente con Cajal y Mulliken. De acuerdo con Herzberg, “a true scientist looks to uncover the mysteries of nature for the sole purpose of advancing human knowledge. The usefulness of this knowledge becomes self-evident after it is discovered. Prime examples of this are X-rays and lasers, both of which were discovered by physicists who had no idea how useful their discoveries would later become.”<sup>31</sup> Es curioso que Ramón y Cajal emplee el mismo ejemplo que Herzberg, los rayos X, para ilustrar este punto. El láser se obtuvo experimentalmente en la década de los cincuenta, pero su fundamento teórico fue establecido por Einstein en 1917.

vi. *La voluntad.* Firmeza y arraigo en el hecho científico. Herzberg fue un ejemplo de voluntad, firmeza y hechos científicos. Voluntad a la hora de decidir su pasión por la astronomía y la espectroscopia molecular, su firmeza para persistir en la obtención del hecho científico y su interpretación, y también en la búsqueda de la financiación para sus proyectos científicos. Asimismo, se debe destacar el ambiente familiar en el que se crió Herzberg, carente de interés por la ciencia, aunque sus padres deseaban que tuviera la mejor educación posible.<sup>32</sup> Su voluntad, su pasión por la astronomía y el buen consejo de algunos de sus maestros le llevaron a la espectroscopia molecular en la carrera de física pero aplicada a la astronomía.

vii. *Trabajo y atención, reflexión.* El Profesor Herzberg estuvo trabajando durante dieciocho años para obtener el espectro del radical libre metileno CH<sub>2</sub>. No se desanimó, sin embargo, intentó buscar todos los medios a su alcance para medir el espectro del metileno, y lo consiguió, con la ayuda de su colaborador Jack Shoosmith. Este fue un trabajo basado en la atención y la reflexión. La complementariedad entre los experimentos y la teoría, al igual que Mulliken, fue una constante en toda su obra científica.

viii. *Concentración.* El saber ocupa lugar, diga lo que diga la sabiduría popular. Toda su carrera científica estuvo centrada en la espectroscopia molecular de moléculas poliatómicas y en la astronomía, o en la aplicación de la espectroscopia molecular a la astronomía. Sus más de 250 trabajos se dedican a esos temas.

ix. *Actitudes.* Qué persona debo ser. a) Independencia de juicio, b) perseverancia en el estudio, c) pasión al servicio de una gran idea, d) patriotismo, e) gusto por la originalidad científica. De la lectura de su biografía se deducen todas las actitudes que figuran en la lista de Cajal. Valga esta anécdota como ejemplo de perseverancia, de lo que Cajal escribió como la pasión al servicio de una gran idea y perseverancia en el estudio: Cuando Herzberg terminó lo equivalente al bachillerato a los 19 años, tenía una fuerte voluntad de ser astrónomo. Buscó entonces guía y consejo en la oficina vocacional de Hamburgo que le dirigió al director del observatorio de Hamburgo; sin embargo, la respuesta final fue negativa. Si quería vivir como astrónomo debía ir a la Universidad y estudiar física. No tenía dinero para pagarse los estudios, así que decidió pedir ayuda por carta a la compañía Hugo Stinnes Lines, de la que recibió una beca con la que pudo pagarse la universidad. Una vez terminó los estudios y comenzó a trabajar, tuvo que viajar para adquirir una formación mayor en el campo de la espectroscopia molecular y la astronomía. Sus problemas no se acabaron, puesto que a su vuelta, con el advenimiento del nazismo, se le prohibió dar clase en la universidad por estar casado con una mujer

---

<sup>30</sup> Los científicos se preguntan cómo funcionan ciertamente las cosas, así que tratan cada vez más averiguar cómo y por qué. Si su trabajo conducirá a algo útil o no, no les importa, porque ellos no lo saben, y para el caso, no están tan interesados. Si usted desarrolla la ciencia sólo con la idea de hacer algo útil, entonces sus posibilidades de descubrir algo útil son menos que si usted aplica su mente a la búsqueda de algo esencial.

<sup>31</sup> Un científico de verdad procura descubrir los misterios de la naturaleza con el único propósito de hacer avanzar el conocimiento humano. La utilidad de este conocimiento se vuelve evidente por sí mismo después de que se descubre. Los principales ejemplos de esto son los rayos X y rayos láser, las cuales fueron descubiertos por físicos que no tenían idea de lo útil que serían sus descubrimientos más adelante.

<sup>32</sup> Interview with Dr. Gerhard Herzberg By Brenda P. Winnewisser At National Research Council, Ottawa, Canadá March 2, 1989. [http://www.aip.org/history/ohilist/5029\\_1.html](http://www.aip.org/history/ohilist/5029_1.html)

de origen judío. Tuvo que exiliarse y se compró un espectrómetro de su propio dinero en Alemania con el que comenzó su trabajo de investigación en la Universidad de Saskatoon (Canadá).

De todas estas cualidades que Herzberg ciertamente poseía, él mismo destacaba la perseverancia en el estudio y la pasión por la espectroscopia y la astronomía. El patriotismo lo definía por su altruismo científico en aras del conocimiento y de la cultura, por su amor a la verdad; buscaba el entendimiento científico de los hechos.

x. *Aptitudes*. Lo que debe saber el investigador: a) cultura general, b) necesidad de especializarse, c) lectura especial o técnica, e) la necesidad absoluta de buscar la inspiración en la naturaleza, f) el dominio de los métodos, y g) en busca del hecho nuevo. El Profesor Herzberg ejemplifica todas las cualidades anteriores. Especialmente la inspiración en la naturaleza fue lo que le llevo a elegir su vocación, la astronomía. Como ya se ha escrito, su primer telescopio se lo fabricó a los doce años.

xi. *Intercambio de ideas*. Su vida profesional estuvo caracterizada por los viajes científicos en busca de una posición permanente con una financiación para sus proyectos de investigación. Su formación procedió en base a su espíritu viajero, con lo que pudo interactuar con los mejores científicos del momento en el campo de la espectroscopia molecular, entre ellos Robert Mulliken.

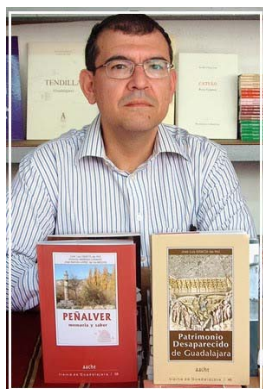


Figura 5. El Profesor J.L.G. de Paz en la feria del libro. In memoriam, 2013.

## **COROLARIO Y HOMENAJE A JOSÉ LUIS GARCÍA DE PAZ.**

Santiago Ramón y Cajal escribió su trabajo “Reglas y consejos sobre investigación científica, los tónicos de la voluntad” a partir de su discurso para su admisión en la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de Madrid en 1897. A pesar de haber transcurrido más de cien años, la mayoría de su contenido sigue siendo, sin embargo, muy actual. Por la comparación de los tres grandes maestros Cajal, Mulliken y Herzberg las siguientes conclusiones pueden obtenerse. I) El método es importante, pero los tres coinciden en que no hay lógica alguna que nos pueda llevar al descubrimiento. Cada uno de ellos utiliza el método científico, pero con matices bien diferenciados: Cajal utilizó un razonamiento deductivo amparándose en la observación y sus habilidades como dibujante, Mulliken conceptualizaba los problemas y utilizó las matemáticas de forma descriptiva más que deductiva, y Herzberg basaba su éxito en la utilización de un razonamiento deductivo que partía de la observación y medida y su especial persistencia en la resolución de los problemas. Todos ellos estaban guiados por la pasión puesta al servicio de una gran idea, la resolución de la estructura del sistema nervioso en el caso de Cajal, o la resolución de la estructura electrónica de las moléculas en el caso de Mulliken y Herzberg. A Cajal se le considera el mejor histólogo de la historia, y a Mulliken y Herzberg los fundadores de la espectroscopia molecular. II) Todos ellos advirtieron de la necesidad de *no dividir la ciencia* en fundamental y aplicada. El hecho de investigar y resolver preguntas esenciales nos lleva necesariamente a la utilidad; tanto Cajal como Herzberg, aun perteneciendo a generaciones

tan distantes en el tiempo se comprometieron en la defensa de una investigación sobre preguntas esenciales. Así como Mulliken, cuya investigación se enfocó en responder a la pregunta ¿qué hacen los electrones en las moléculas? Herzberg enfocó su investigación en la comprensión de la estructura electrónica de moléculas difíciles de atrapar, como los radicales, que también estaban presentes en la atmósfera de otros planetas o en nubes de polvo interestelares. Ninguno de los temas de investigación, ni las preguntas que se propusieron responder han sido hasta el momento respondidas de una forma completa –aunque los tres investigadores ganaron el premio Nobel. III) Los tónicos de la voluntad de Cajal, se podrían renombrar, asimismo, los tónicos de la motivación, aquellos que llevan a cualquier científico a la transcendencia, *al amor por la verdad*. IV) El patriotismo de Cajal como signo de excelencia, agradecimiento y altruismo dirigido a la sociedad en la que se vive se encuentra también ilustrado por Mulliken y Herzberg. Aunque, en el caso de Herzberg tiene un carácter más ecuménico. La excelencia se interpreta como salir de uno mismo para contribuir a la sociedad, como entrega a los demás, bien comunicando sus trabajos o bien formando a otros investigadores, lo es una constante en los tres maestros estudiados. V) El trabajo arduo, constante y reflexivo, crea talento dice Cajal, y se muestra como una constante en Mulliken y Herzberg. VI) La complementariedad de la teoría y el experimento fue una de las cualidades sobresalientes de los tres. Cajal, Mulliken y Herzberg representan la solidez docente e investigadora al servicio de una gran idea y de la sociedad misma en la que vivieron y a la que reconocieron deber todo lo que consiguieron.

Por último, aunque no menos importante, me gustaría dedicar este pequeño estudio al Profesor José Luis García de Paz (Figura 5), un docente excelente, también excelente investigador y amigo. Excelencia que demostró desde el punto de vista esencial, se caracterizó por su entrega a los demás, por la formación de sus alumnos de licenciatura o grado, y por la formación de alumnos de master o fin de carrera. El Profesor de Paz trabajaba al igual que Mulliken en química cuántica, fue alumno de los Profesores Javier Catalán y Manuel Yañez, colaboró con Enrico Clementi, quién asimismo fue discípulo de Robert Mulliken y Michael Kasha. De Paz también ejemplifica los tónicos de la voluntad de Ramón y Cajal: A) Aplicaba los cálculos teóricos *ab initio* con un gran dominio de la técnica –era experto en aplicar la informática a la química- en estructuras moleculares a veces sencillas, a veces complejas y de donde se pueden obtener las transiciones electrónicas, o también vibracionales y rotacionales. De fuerte voluntad, realizó sus estudios de doctorado a la vez que trabajaba a tiempo completo en IBM –desarrollando software de aplicación en refinerías de petróleo. B) El trabajo, la atención y la reflexión le caracterizaban, que aplicó no sólo a la química sino también a la historia de los Mendoza, de Guadalajara, y en especial de Tendilla –el pueblo de su familia. El Profesor de Paz, o Pepe, se entregó a sus alumnos de forma servicial, pero también al departamento de Química Física Aplicada en numerosos puestos de gestión y administrativos. La independencia de juicio, la perseverancia en el estudio, y la pasión al servicio de una gran idea –en el caso de Pepe, la química cuántica y Tendilla, fueron sus dos grandes pasiones. Muchos de sus alumnos se han preguntado ¿qué pinto en la Universidad Autónoma de Madrid? Estoy seguro que la respuesta de algunos de ellos sería encontrar a los mejores maestros, que viven lo que enseñan y enseñan lo que viven. Pepe fue uno de esos maestros para muchos de sus estudiantes con los que tuvo su mayor dedicación. Además, Pepe fue una persona dedicada cariñosamente y con esmero a su familia, su otra gran pasión, especialmente a su mujer María y su hija Marta.

José Luis García de Paz tuvo un fuerte sentimiento de filiación, aprendió de grandes maestros; esponsalidad, puesto que recibió y también se dio, se entregó como un don a los demás; y fue fecundo, publicó más de cien artículos científicos, educó y formó en la investigación a sus alumnos de licenciatura, grado, postgrado, dirigió trabajos fin de máster, trabajos fin de grado, tesinas y otros. Busco la verdad y fue una persona plena, enseñó desde la perspectiva del amor. Presentaba un talento genial y especial, de los rápidos como indica S. Ramón y Cajal, brillante y sugestivo, excelente en la producción. Supo ocupar un espacio y tiempo insustituible por sus conocimientos profundos sobre informática aplicada a la química, no sólo en la Universidad Autónoma de Madrid, sino también en empresas como Repsol, Unión Española de Explosivos e IBM. José Luis se hizo imprescindible para muchos grupos de investigación gracias a sus conocimientos sobre química y computación y su

carácter extrovertido y humano. Sus tareas académicas de química las compaginó con las extraacadémicas con igual o mayor éxito si cabe, así convirtiéndose en un experto de la historia de los Mendoza “cuya genealogía conocía como nosotros recitamos la alineación del Real Madrid”;<sup>33</sup> y recopilador de los tesoros artísticos de Guadalajara, y Tendilla (Guadalajara), de cuyo trabajo publicó numerosos libros y artículos de referencia nacional e internacional. J.L.G. de Paz será recordado por ser un buen amigo que supo ser feliz ayudando a los demás, como un buen trabajador de talento rápido que destacó por su excelencia en química e historia del arte.<sup>34</sup>

---

<sup>33</sup> <http://henaresaldia.com/garcia-de-paz-la-huella-de-un-sabio/>

<sup>34</sup> <http://www.aache.com/alcarrians/garciadepaz.htm>