

# La química española vista por sus protagonistas

Otilia Mó

Frustrado de la amistad que nos une, Miguel Ángel Sierra me ha pedido a mí también que escriba un artículo para esta sección. Evidentemente teniendo en cuenta los autores que me precedieron en la misma José Elguero<sup>[1]</sup> y Manuel Martín-Lomas,<sup>[2]</sup> además del honor que ello supone, me preocupa mucho no estar al nivel, pero espero de la benevolencia de los lectores que me perdonen el atrevimiento. La ventaja es que, con la disculpa de evitar solapamientos, usaré sobre todo los datos de ambos artículos en lo que se refiere a avances normativos que nos afectaron a todos.

Como niña del rural gallego,<sup>[3]</sup> que ilustra bien la fotografía tomada en mi escuela rural a la que acudía cotidianamente, mi primer contacto con la química fue en el bachillerato en Pontevedra, donde tuve la suerte de tener un profesor estupendo que transmitía un entusiasmo enorme por el mundo de la química, aunque, por supuesto, no había laboratorio ni nada parecido.

En aquel entonces, sin embargo, el mensaje que más caló en mi ánimo fue que lo realmente importante era entender las razones de los cambios en la naturaleza, convencimiento que hoy por hoy sigue siendo el combustible que alimenta mi pasión por la investigación. Ya en la Universidad de Santiago de Compostela (curso 1965-66) en Selectivo (1.º de la Licenciatura en Químicas) tuve mi primer contacto con la química moderna de la mano de Miguel Ángel Herráez, que sucedía en la cátedra de Química Física a Tomás Batuecas.<sup>[4]</sup> Herráez era poco ordenado en sus exposiciones pero abría ante nuestros ojos un nuevo mundo de orbitales, electrones y spines que hacían interesantísimo el aprendizaje de la materia. Cuando cursábamos 4.º de carrera<sup>[5]</sup> la fundación Barrié de la Maza regaló a la universidad de Santiago un ordenador IBM de 8 kB



Fotografía tomada en la Escuela Unitaria de Lira (Salvaterra de Miño, Pontevedra) en el curso 1954-1955

de memoria e IBM concedía una beca para estudiantes de 4.º o 5.º para hacer un curso de programación FORTRAN. Manuel Yáñez y yo solicitamos y compartimos dicha beca. En ese momento nuestro profesor de Química Física I, era Miguel Ángel Ríos, que además de ser el método andando como profesor, fue el que nos animó a solicitar la beca de IBM porque, en su opinión, ese era el campo más novedoso en el que la química del futuro tenía que avanzar. Esta fue la razón por la que nos inclinamos, Yáñez y yo, a hacer la tesina de licenciatura con Ríos y a desarrollar los programas de cálculo computacional para dicho trabajo.<sup>[6]</sup>

Terminada la carrera (junio de 1970) conseguimos un puesto de profesores de Física y Química en la Universidad Laboral de Cheste (Valencia), con la ventaja que ello nos permitía comenzar (en horario de tarde) nuestro trabajo de Tesis Doctoral en la Universidad de Valencia bajo la dirección de José Ignacio Fernández Alonso.<sup>[7]</sup> La capacidad de cálculo en Valencia un IBM1620 era de 16 kB, que aunque con nuestra visión de hoy supone una capacidad absolutamente ridícula, duplicaba la capacidad del que habíamos usado en Santiago. Al concluir ese curso Fernández Alonso se trasladó a la Universidad Autónoma de Madrid (creada en 1968) para poner en marcha la especialidad de



O. Mó

Profesora Emérita  
Departamento de Química  
Universidad Autónoma de Madrid  
C-e: [otilia.mo@uam.es](mailto:otilia.mo@uam.es)

Recibido: 17/06/2019. Aceptado: 01/07/2019.



Foto de los estudiantes de doctorado y posdoc de J. A. Pople en un congreso organizado por F. Schaefer en Athens (Georgia, EE. UU.) en honor de Pople, en 1989, estábamos convencidos que ese año obtendría el premio Nobel. Sin embargo, habría que esperar a 1998 para que eso sucediera

Química Cuántica y nos ofreció la posibilidad de incorporarnos con su grupo a la misma, para lo cual solicitamos y obtuvimos una beca del Ministerio de Educación para la realización de la tesis doctoral. Empieza nuestra vida de becarios de doctorado en el campus de Cantoblanco de la UAM. Recordar que en ese momento no existían paquetes de programas de cálculo ni nada parecido, así que cada uno desarrollaba su programa en fichas perforadas (el mío llegó a ser de 1600 fichas perforadas que llevábamos en 1 caja de fichas de una capacidad máxima de 2000 a la calle Vitruvio al UNIVAC 1108. En enero de 1974 defendí mi Tesis Doctoral “Contribución al estudio teórico de complejos de transferencia de carga” con la máxima calificación y premio extraordinario. Los resultados fueron publicados<sup>[8]</sup> en el *Journal of Physical Chemistry*.

En septiembre de 1971 había asistido a mi primer congreso internacional “QUITEL” congreso internacional de química teórica de expresión latina celebrado en Granada, organizado por Fernández Alonso en donde conocí a Daudel, Alberte y Bernard Pullman y muchos de los químicos teóricos de Pisa, donde en ese momento había un grupo importante de Químicos Teóricos (Scroco, Moccia, Tomasi, etc.). Este fue, sin duda, mi bautizo científico a nivel internacional. Esta serie de congresos todavía existen a pesar del indudable dominio de la lengua inglesa. Mi segundo congreso internacional fue en 1973 en Menton (Francia) en un congreso auspiciado por la IAQMS (Internacional Academy of Quantum Molecular Sciences) que había sido fundada por Raymon Daudel, Bernard y Alberte Pullman, Pople (que sería premio Nobel de Química en 1998), Mulliken, Parr, etc., y cuyo presidente de honor fue nada menos que De Broglie. Allí presenté los resultados de mi Tesis ante todos esos grandes nombres de la Química Cuántica en ese momento.

Siempre estimulados por Fernández Alonso, en 1974 nos incorporamos como Posdoctoral Research Associate al grupo de John A. Pople en la Carnegie Mellon University en Pittsburgh (Pennsylvania, EE. UU.), Manuel Yáñez con una beca de Intercambio Cultural entre España y los EE. UU.<sup>[9]</sup> y yo con una beca más modesta del Ministerio de Educación. En ese momento ya llevábamos a nuestra hija María de 18 meses con nosotros.

Los dos años de nuestra estancia fue muy rica desde el punto de vista científico, aprendimos mucho y tuvimos una participación directa en lo que sería más tarde el programa GAUSSIAN 70. El grupo de Pople era muy activo, coincidimos con muchos jóvenes científicos llamados a ser grandes figuras como Martin Head-Gordon, Saru Vishveswara, Krishnan Raghavachari, Rolf Seeger que junto con Steve Binkley desarrollaba en esos momentos los primeros códigos capaces de dar cuenta de la correlación electrónica mediante el método de perturbaciones de segundo orden de Möller y Plesset, acabaría por ello siendo mundialmente conocido como método MP2.

A nuestro regreso de EE. UU. y ya como profesores adjuntos interinos continuamos nuestra carrera como profesores, ya que antes de irnos habíamos participado en clases prácticas de diferentes laboratorios. Por lo que se refiere a la investigación en la Universidad en ese momento (1976) y a pesar de los planes de desarrollo que, de acuerdo con los datos de Martín-Lomas,<sup>[2]</sup> recibía una financiación equivalente al 0,24% del PIB, no se establecieron convocatorias reguladas y continuadas hasta la aprobación de la LRU en 1983. Fueron sin embargo unos años de movilización y discusión importantes que propiciaron la gran transformación social que estaba teniendo lugar en todo el país, pasando de una dictadura (Franco murió cuando nosotros estábamos en EE. UU.) a una incipiente democracia que



Foto de la primera reunión en Pitlochry (Escocia) del grupo COST D26 en 2005

la mayoría creíamos podía mejorar la situación de todos los españoles en todos los ámbitos. Conviene aquí recordar que el profesor Pedro Martínez Montávez en 1978 en la UAM fue nuestro primer rector democráticamente elegido. En ese mismo año obtuvimos por oposición nuestra plaza de Profesores Adjuntos.

La LRU establecía definitivamente el doble carácter docente-investigador de los profesores universitarios y es a partir de ese momento que comenzaron las convocatorias regulares de proyectos. Nosotros participamos en dichas convocatorias por primera vez en 1984 con un proyecto de la CAICYT. A partir de entonces y hasta ahora hemos mantenido nuestra financiación de proyectos de I+D del plan nacional, así como el becario de FPI asignado a cada uno de ellos.

Con proyecto propio se regularizó nuestra asistencia anual a diferentes congresos internacionales. A ello contribuyeron positivamente dos factores, la posibilidad de hacer en España cálculos *ab initio* con la versión del Gaussian-70, no comercializado a la sazón, pero que el profesor Pople nos autorizó a traer para ser instalado primero en el Univac de Vitrubio y luego en el IBM 360/65 de la UAM,<sup>[10]</sup> y la gran ventaja de tener estudiantes becados a los que dirigir la Tesis Doctoral. Todo ello nos llevó automáticamente al establecimiento de colaboraciones internacionales con otros grupos teóricos, pero también con grupos experimentales de espectrometría de masas, campo en el que los cálculos teóricos juegan un papel crucial a la hora de conocer los mecanismos de reacción que ocurren en fase gas.<sup>[11]</sup> Una sólida colaboración se consolidó, de hecho, con el grupo de los profesores J. P. Morizur y Jeanine Tortajada en la Universidad Pierre et Marie Curie con un primer proyecto de Acción Integrada Hispano-Francesa en 1994, que se repetirían periódicamente hasta 2004 con visitas anuales a París de gente de

nuestro grupo y del grupo de París a Madrid. Esta colaboración sigue estando en plena vigencia y un número significativo de nuestros estudiantes hicieron diferentes estancias en la Universidad P. et M. Curie primero y en la Université d'Evry val d'Essonne después, a la vez que nosotros recibíamos un número parecido de estudiantes franceses en nuestro grupo. Igualmente fructífera fue y es la colaboración mixta con la Université de Nice Antipolis, profesores J. F. Gal y P. C. Maria, y la Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes, profesor J. C. Guillemain, que al igual que las anteriores continúa activa.

Colaboraciones similares, aunque más cortas, se establecieron con la Universidade Nova de Lisboa, profesor M. A. Almoester-Ferreira, con la Universidad de California Irvine, profesor R. W. Taft, con la Universidad de la Sapienza de Roma, profesor F. Cacace, entre otros.

Simultáneamente y a nivel nacional nuestras colaboraciones han sido muy intensas con el grupo del profesor Abboud y el grupo de los profesores Elguero y Alkorta, ambos del CSIC, además de otras, mas puntuales, con diferentes grupos del Departamento de Química Orgánica e Inorgánica de la UAM y el de Química Orgánica de la Complutense.

Un punto de inflexión importante se produce en 2004 con la obtención del primer proyecto europeo, una Acción Cost D26, que involucraba a los grupos de Niza, Evry, Ecole Polytechnique de París, University of New Castle upon Tyne, el Ruder Boskovic Institute de Zagreb y la Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes. Con todos los grupos involucrados hemos tenido colaboraciones fructíferas que se han extendido en el tiempo largamente.<sup>[12]</sup>

Después de esta primera Acción Cost hemos participado en dos más en diferentes períodos.

En 1998 el Ministerio de Educación publica un nuevo decreto de doctorado en donde se exige un mínimo de 10



estudiantes/año por programa. Desde la perspectiva de la química teórica ese requerimiento sería inalcanzable en la mayoría de las universidades no sólo españolas, sino europeas, lo que planteaba un serio problema para el futuro inmediato de esta disciplina. A este hecho la constatación de que la formación matemática y física requerida en esta disciplina es muy alta exigía de los graduados que la tomaran un plus de formación en tales áreas, que no siempre es posible cubrir a nivel local. Con este decorado de fondo y aprovechando la estancia como catedrático visitante BBVA del Profesor australiano Leo Radom, la estancia en San Sebastián del profesor canadiense Russell Boyd, y de los profesores Ian Cooper (Reino Unido) y Jeanine Tortajada (Francia), en nuestro grupo, organizamos en La Cristalera (Residencia que la UAM tiene en las montañas de Madrid, cerca de Miraflores de la Sierra) un simposio al que invitamos a todos los grupos de químicos teóricos españoles, y en el que inevitablemente abordamos con seriedad el reto que se nos planteaba. El resultado de esa reunión no solamente fue la decisión del colectivo de químicos teóricos españoles de solicitar un doctorado interuniversitario, sino prácticamente toda la estructura y el programa del mismo. Pasados unos años surge la normativa de los máster y el programa de doctorado se convierte en un máster a nivel europeo, que con la denominación Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM) y con un total de 7 universidades involucradas, que coordinadas por la UAM, incluían Perugia, Toulouse, Leuven, Groningen, Oporto y Valencia, sería el primer máster europeo con Eurolabel de la European Chemistry Thematic Network (ECTN) y que en 2009 recibiría el marchamo Erasmus Mundus por 5 ediciones, y posteriormente prorrogado por 3 ediciones más, dentro del nuevo marco Erasmus+. Aunque el Master Erasmus Mundus TCCM solo incluía por parte de Es-

paña las Universidades Autónoma de Madrid y Valencia, era seguido por los estudiantes de los demás grupos teóricos de otras universidades que participan en este mismo máster como instituciones asociadas al mismo.

Este mismo consorcio ampliado con la Universidad del País Vasco, Barcelona, Viena y Pierre et Marie Curie puso en marcha un Doctorado Europeo para el que se consiguió un proyecto ITN EJD en 2013. Ambos proyectos, Master y Doctorado, en este momento están a punto de finalizar, pero nuestro colectivo ya ha elaborado propuestas avanzadas a ambos niveles para seguir concurriendo a las convocatorias europeas.

Una consecuencia adicional de nuestra reunión de 1998 en Miraflores ha sido que a partir de ese primer evento y con una periodicidad bianual la comunidad española de químicos teóricos ha venido organizando la serie de congresos internacionales "Electronic Structure. Principles and Applications" (ESPA) especialmente pensado para que nuestros estudiantes de doctorado tengan un foro internacional para presentar sus resultados. El ESPA 2018 se ha celebrado en Toledo y hacia el número 11 de la serie, el siguiente se celebrará en Vigo en 2020.

El colectivo español de químicos teóricos participa además en diversos foros internacionales, ya sea a nivel personal o como representantes de nuestras instituciones o de nuestro país. Sin ir más lejos, he sido, por ejemplo, la primera representante española en la ECTN. El profesor Joan Bertrán lo fue en el EUCCO (European Comision on Computational Chemistry), y le sucedería el profesor Manuel Yáñez, que también lo es en la World Association on Theoretical Oriented Chemists (WATOC), cuya actividad fundamental, además de otorgar las Dirac y Shrödinger Medals para investigadores junior y senior, respectivamente, es la organización trianual del Congreso mundial más importante en este campo. En julio de 2011 la organiza-



Grupo de estudiantes y profesores de la primera promoción del máster europeo "Theoretical Chemistry and Computational Modelling", en el curso intensivo 2010 celebrado en la UAM



Anuncio en la Facultad de Medicina de la Universidad de Santiago del WATOC 2011

ción de dicho Congreso nos fue concedida y el congreso se celebró en Santiago de Compostela con una asistencia de 1350 congresistas de 62 nacionalidades, lo que suponía un record absoluto en toda la historia de estos eventos.

En ese mismo período de tiempo, a nivel español se ponían en marcha los proyectos Consolider 2010. Esta iniciativa abrió las puertas a la cooperación entre grupos de investigación de todo el país, lo que permitía potenciar una de las características más definitorias de la ciencia moderna, la interdisciplinaridad, permitiendo que grupos de química teórica como el nuestro trabajaran coordinadamente con grupos experimentales en muy diversas áreas, que a su vez contribuyó a la creación de redes científicas eficaces no solo a nivel nacional sino también a nivel internacional.

El 1 de mayo de 2008 fui nombrada Directora General de Programas y Transferencia de Conocimiento de la Secretaría de Estado de Universidades del Ministerio de Ciencia e Innovación. Durante el corto tiempo que trabajé en ese puesto fui responsable de los programas del plan nacional de I+D, Consolider, y becas FPI, pero también de la política de parques científicos y tecnológicos cuya financiación experimentó una gran expansión en ese período. Pero si de algo me siento especialmente orgullosa fue de la puesta en marcha del programa de Campus de Excelencia, que propició el que las Universidades públicas hiciesen un examen crítico de su actividad y de su potencial, que les llevó a definir con realismo sus áreas de

especialización y que fomentó una colaboración planificada con los distintos Organismos Públicos de Investigación (OPIS). Esto dio una nueva dimensión a la investigación científica en nuestro país.

A nivel de los investigadores jóvenes, los contratos Juan de la Cierva y Ramón y Cajal han supuesto una manera eficaz de reincorporar a los investigadores posdoctorales más brillantes a las instituciones españolas. También apuntar que a nivel de las diferentes Comunidades Autónomas han surgido distintas iniciativas para promover la generación de conocimiento. Destacaría especialmente el caso de las Comunidades de Cataluña (Programa ICREA) y País Vasco (Programa Ikerbasque), aunque en todas las comunidades se ha hecho un esfuerzo en esta dirección, si bien con diferente presupuesto.

Lamentablemente, al llegar a este punto, me resulta doloroso constatar que debido a la crisis económica de 2009-2010 o usándola como justificación, ha habido un claro recorte en la financiación de proyectos I+D+i, de contratos de personal, tasa de reposición 0, etc. que han afectado muy negativamente a la ciencia española en general y a la química en particular.<sup>[13]</sup>

Como hemos indicado anteriormente, a lo largo de este período nuestro grupo de investigación ha centrado sus esfuerzos en el estudio teórico de las propiedades intrínsecas de diferentes sistemas de interés químico y bioquímico, así como a la interacción de los mismos con cationes metálicos y más recientemente al estudio de interacciones no-covalentes como origen y motor de un gran número de fenómenos en química. Como no puede ser de otra manera en el marco de la investigación moderna, este esfuerzo se ha realizado en colaboración con diferentes grupos tanto nacionales como internacionales<sup>[14]</sup>. La lista de publicaciones puede encontrarse además de en las plataformas de Google scholar y web of Science en el número especial de *J. Phys. Chem. A* **2018**, *122*, 5681-5697, que esta revista nos ha dedicado, al profesor Yáñez y a mí, con motivo de nuestra jubilación.

Creo que puede ser un perfecto reflejo de la evolución de la química en general, y de la química teórica en particular a lo largo de estos años, el seguimiento de las carreras de nuestros doctores, de los doctores egresados de las diferentes instituciones españolas. Permítanme que particularice esta afirmación en el colectivo que mejor conozco, el de los doctores en Química Teórica y Computacional de mi entorno más inmediato, que además de tener una fuerte base en Física y Matemáticas desarrollan importantes habilidades en informática y desarrollo de software, lo que les ha abierto, en muchos casos, las puertas en el mercado laboral de la informática aplicada. Así nuestro primer doctor (1982) después de sus estancias posdoctorales ha terminado siendo un alto responsable en una empresa de servicios informáticos; los tres siguientes (1985, 1986 y 1990) después de brillantes carreras científicas son profesores universitarios; el siguiente (1994) es director de un centro de Supercomputación; la siguiente (1998) se habilitó en la Freie Univ. de Berlín y en la actualidad es Full professor de la Universidad de Viena; la siguiente (1998), a la sazón profesora de bachillerato, hizo su tesis con dedicación par-





Foto de nuestro grupo de investigación en 2013

cial y ahora ya Doctora, continúa siendo profesora de bachillerato; la siguiente (1999) después de una gran carrera en empresas informáticas es empresaria en nuestro país. El siguiente (2002) es de nuevo profesor universitario. A este le sigue (2003) un director técnico en un centro de Supercomputación y una contratada Ramón y Cajal (2005).

Y estamos en los albores de la crisis. A partir de ahí empezamos a encontrarnos con harta frecuencia con casos en los que después de una o varias estancias posdoctorales en centros internacionales nuestros postdocs se encuentran totalmente abandonados. Con la disculpa de la crisis económica se rebajan claramente las aportaciones a los servicios públicos y en particular a la investigación, y volviendo a los doctores egresados de nuestro grupo, los postdocs de ese período no tienen cabida en nuestro sistema. Afortunadamente para ellos, pero no para nuestro país, uno se encuentra desarrollando su trabajo de investigación en un College en Irlanda, otro como director de Laboratorio de Modelización de reciente creación en una empresa alemana, y el tercero como coordinador de un laboratorio científico en Dinamarca. En aras de la ecuanimidad, debo reconocer que en estos últimos meses hay indicios que conducen a la esperanza, pero sin demasiadas alharacas. Los dos últimos doctores que leyeron sus Tesis en 2014 y 2017, se encuentra un panorama ligeramente más positivo, y la primera regresa a la UAM dentro del programa de la CAM de captación de talento y la segunda se encuentra como posdoc en Estocolmo.

Creo que es evidente que nuestros doctores han hecho toda una carrera homologada a nivel internacional y demostrado su excelente formación, lo que claramente contrasta con las épocas de nuestro inicio de carrera profesional, pero no siempre nuestro país les ofrece oportunidades para que puedan invertir su *saber hacer* dentro de sus fronteras. Es urgente por tanto entender que la inversión en I+D+I es una inversión de futuro de la que depende

nuestro devenir en una sociedad cada vez más avanzada científica y tecnológicamente, es impensable volver al “que investiguen ellos”. Todos hemos de hacer un gran esfuerzo para conseguir que nuestra sociedad así lo comprenda y se pueda establecer una política científica coherente y a largo plazo.

A modo de conclusión creo que solo me queda resaltar que nuestra generación ha vivido la expansión e internacionalización de la Química española, con un discurrir difícil, pero que nos permitió alumbrar varias generaciones de científicos punteros a nivel mundial, lo que llevó a la ciencia española desde las catacumbas en las que se encontraba a principios del pasado siglo, salvo honradísimas excepciones, hasta puestos preeminentes en los albores del actual. Ojalá que esta etapa más reciente en la que los fondos destinados a la I+D a nivel nacional ha descendido notoriamente a pesar de los esfuerzos hechos por distintas organizaciones en contra de este hecho, sea solo un mal sueño, y que de nuevo reine la sensatez a la hora de mirar hacia el futuro.

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] J. Elguero. *An. Quím.* **2015**, *111*, 25-28.
- [2] Manuel Martín-Lomas. *An. Quím.* **2015**, *111*, 77-82.
- [3] Más detalles pueden encontrarse en *J. Phys. Chem. A* **2018**, *122*, 5673-5678.
- [4] Tomás Batuecas era un ilustre catedrático de Química Física, bajo cuya dirección se obtuvieron los valores numéricos, con la mas alta precisión posible en esos momentos, de un gran número de masas atómicas (todavía cuando nosotros llegamos seguía dirigiendo una tesis doctoral en el tema). Además fue el gran defensor de que la unidad de masas atómicas fuera 1/12 la masa atómica del isótopo 12 del Carbono consiguiendo así que dicho valor fuese el adoptado por físicos y químicos.

- [5] En ese curso nuestro profesor de Química Orgánica I era Ignacio Ribas Marqués, uno de los participantes en el primer GEQOR que cita Elguero y que en ese momento ya era muy conocido por el descubrimiento de nuevos productos naturales y de hecho el que atraía a más estudiantes para hacer la Tesis Doctoral.
- [6] M. A. Herráez, O. Mó y M. A. Ríos. Estudio Teórico de la Reactividad de Cresoles. Cloración. *Afinidad* **1971**, *28*, 1135-1137.
- [7] Fernández Alonso había hecho la Tesis Doctoral en Santiago de Compostela bajo la dirección de Tomás Batuecas, aunque, como todo el mundo en aquellos años, la tuvo que presentar en la Universidad Central de Madrid, ya que era en la única universidad donde estaba permitido. Había hecho estancias posdoctorales en CALTECH y en París.
- [8] O. Mó, M. Yáñez y J. I. Fernández Alonso. Theoretical study of charge-transfer complexes. *J. Phys. Chem.* **1975**, *79*, 137-142.
- [9] Las becas de Intercambio cultural entre España y los EE. UU. estaban gestionadas por la Fundación Fulbright servían a modo de pago de los EE. UU. por el uso de las bases militares que se les había permitido instalar en España. Con esas becas muchos futuros científicos españoles tuvieron la oportunidad de formarse en los mejores grupos de investigación de EE. UU. Nosotros tuvimos la suerte de hacerlo en el grupo de J. A. Pople que sería premio Nobel de Química en 1998.
- [10] Al poco tiempo de regresar de EE. UU. IBM suscribió un acuerdo con la UAM por el que instaló un centro de cálculo propio en la UAM con el compromiso que permitirían a los investigadores de la UAM parte de su uso. El primer Centro de Computación de la UAM se instalaría años más tarde siendo Cayetano López rector (1985-1994).
- [11] M. Alcamí, O. Mó, O. y M. Yáñez, Computational Chemistry. A useful (some times mandatory) tool in mass spectrometry studies. *Mass Spectrom. Rev.* **2001**, *20*, 195-245.
- [12] Detrás de este tipo de proyectos europeos aparecerían los financiados por la ERC (European Research Council, 2007) organismo que tiene como misión financiar proyectos de excelencia y punteros en su actualidad y enfoque, y además fortalecer el sistema europeo de investigación. Este hecho ha ayudado a cambiar también en España el panorama científico. Es importante indicar que esta financiación está diseñada para ser una financiación extraordinaria y por tanto no se debe tomar como sustitutiva de la financiación de cada país a su sistema de I+D+i.
- [13] Durante años, con mayor o menor regularidad el presupuesto para I+D dedicado al plan nacional se fue incrementando, lo cual supuso que un gran número de grupos con una producción científica razonable consiguieran financiación. Una de las peores consecuencias de la última crisis económica fue la reducción notable (ver los informes de la COSCE) del presupuesto dedicado a I+D. En mi opinión este es un error gravísimo ya que esa es la mejor inversión para el futuro del país ([http://www.cosce.org/pdf/informe\\_COSCE\\_DECIDES\\_2018\\_politicas\\_cientificas.pdf](http://www.cosce.org/pdf/informe_COSCE_DECIDES_2018_politicas_cientificas.pdf)).
- [14] la lista de colaboradores puede consultarse en la publicación de *J. Phys. Chem. A* **122**, 5679-5680 (2018) que aparece en el número especial que dicha revista nos ha dedicado con motivo de nuestra jubilación.

