



Excmo. y Magnífico Sr. Rector de la Universidad de Córdoba

Presidenta del Consejo Superior de Investigaciones Científicas,

Profesor Fernández de Buján,

Profesor Alberto Marinas, colegas, amigos y amigas, señoras y señores.

La Universidad de Córdoba a propuesta del departamento de Química Orgánica y con el apoyo de mis colegas de los departamentos de Química, la junta de la Facultad de Ciencias y el Instituto Universitario de Química Fina y Nanoquímica, me acoge hoy como Doctor Honoris Causa. Quiero agradecer el honor que me hacen al aceptarme en el claustro de esta universidad a la que me unen, no sólo lazos profesionales sino además, y muy especialmente, afectivos. Gracias Señor Decano de la facultad de Ciencias Profesor Manuel Blázquez por su apoyo, y muchas gracias querido Alberto por tus cariñosas palabras, tu trabajo al servicio de todos, y tu honradez personal y profesional.

Para mí es especialmente entrañable que sea el departamento de Química Orgánica de la Universidad de Córdoba el que me haya propuesto como Doctor Honoris Causa, ya que tanto en lo que fue su constitución, como en su posterior desarrollo, ha sido una fuente de inspiración para la creación de nuestro grupo de investigación y del Instituto de Tecnología Química. El departamento de química orgánica de la Universidad de Córdoba se constituyó en el año 1976, con un grupo de jóvenes profesores, Juan Manuel Campelo, César Jiménez y María Ángeles Aramendía, liderados por el fundador y figura indiscutible profesor José María Marinas.

El grupo creció rápidamente con la incorporación de los profesores J. V. Sinisterra, Víctor Borau, Diego Luna, Ángel García y Felipa María Bautista Rubio. El departamento funcionaba como un solo grupo de investigación que aprovechaba las sinergias y complementariedad de sus componentes. El Profesor Marinas y su grupo fueron innovadores dentro del campo de la química orgánica en España, ya que trabajaban en síntesis orgánica con catalizadores sólidos, no en la manera en la que lo hacían muchos de sus colegas, utilizando catalizadores sólidos comerciales, sino que "Los Cordobeses", como cariñosamente llamábamos al grupo del profesor Marinas, intentaban diseñar y preparar catalizadores adecuados para cada reacción específica. Crearon, de la nada, un verdadero grupo de investigación con un proyecto común y objetivos compartidos. He aquí dos puntos que sirvieron de inspiración a un joven investigador como yo que, a principios de los 80 y tras regresar del departamento de Ingeniería química de la Queen's University de Canadá, se incorporaba al Instituto de Catálisis y Petroquímica del CSIC en el que existían casi tantos grupos de investigación, como investigadores. Mi primer objetivo fue crear un grupo multidisciplinar que fuese capaz de cambiar la metodología



predominante basada en prueba y error, por una metodología más avanzada basada en un mayor conocimiento de la síntesis de los materiales, caracterización químico-física de los mismos, estudios mecanísticos de la reactividad y lo que ya entonces vislumbré como un arma cargada de futuro: La modelización molecular. Mediante esta metodología de trabajo podríamos aproximarnos mejor al conocimiento de los centros activos del catalizador y a su generación durante los procesos de preparación y activación. Necesitaba pues, crear un equipo de trabajo formado por especialistas en química inorgánica, química-física, química orgánica e ingeniería química. En aquellos años, mis trabajos se dirigieron al estudio de reacciones catalíticas en el campo de la petroquímica. Gracias al contacto temprano con empresas relacionadas con el refino del petróleo y la fabricación de catalizadores, observé que las inversiones de estas compañías, en investigación y por tanto la contratación de proyectos con nuestro grupo, oscilaba más o menos periódicamente con el precio del crudo. Al mismo tiempo los beneficios e inversiones de la industria química evolucionaban casi en oposición de fase con los de la industria del refino. Resultaba pues evidente que debíamos extender nuestras investigaciones en catálisis también al campo de la química, si queríamos mantener una estabilidad en los ingresos por contratos con empresas, que eran nuestra mayor fuente de financiación. Más aún, cuando observamos que los conceptos catalíticos y en muchos casos los catalizadores eran los mismos en los campos del refino y de la química, comprendimos que podríamos trasladar fácilmente nuestro conocimiento.

Fue en ese momento en el que los estudios del grupo del Prof. Marinas sobre catalizadores sólidos amorfos ácidos y básicos en reacciones de química fina nos sirvieron de base e inspiración. Sin embargo, habiendo trabajado con catalizadores de sílice-alúmina comprendí la dificultad de sintetizar materiales amorfos sólidos con centros bien definidos y homogéneos. Esta fue la razón por la que decidimos trabajar con materiales cristalinos cuya estructura pudiese ser conocida y los centros identificados. Si estas condiciones se cumpliesen, debería ser posible modelar los catalizadores y encontrar correlaciones estructura-reactividad, que tan necesarias son para comprender el fenómeno catalítico.

Éste fue realmente el principio de nuestro grupo de investigación, todavía en el Instituto de Catálisis y Petroquímica. En el año 1990, sobre la base de un equipo único multidisciplinar y los conceptos y metodología de trabajo antes expuestos, nos lanzamos, a una nueva aventura: la creación del Instituto de Tecnología Química, un centro mixto entre el Consejo Superior de Investigaciones Científicas y la Universidad Politécnica de Valencia.

El nombre que elegimos para el instituto se correspondía exactamente con lo que era nuestro objetivo programático: generar ciencia básica y transferir el conocimiento adquirido al sector productivo. Creíamos y seguimos creyendo en la ciencia como fuente de conocimiento y como herramienta para mejorar la vida de las personas.



Así pues, nuestra actividad principal en los primeros momentos del Instituto de Tecnología Química, se centró en el campo de la catálisis heterogénea. Si definimos los catalizadores sólidos como materiales capaces de aumentar la velocidad de una reacción química y dirigirla hacia el producto deseado, entenderemos que la catálisis se sitúa en el corazón de lo que se denomina química sostenible. En efecto, el desarrollo de catalizadores nos permite utilizar mejor las materias primas y disminuir o evitar la formación de subproductos.

La química y más específicamente la catálisis han sido responsables de grandes revoluciones tecnológicas. Así el descubrimiento por Haber-Bosch y Mittasch de un catalizador capaz de producir amoníaco a partir de nitrógeno e hidrógeno, fue el origen de los fertilizantes sintéticos y cambió para siempre la agricultura, permitiendo una explosión demográfica sostenible. El desarrollo de polímeros orgánicos ha cambiado nuestras vidas y permite obtener materiales avanzados con aplicaciones en alimentación, transporte, salud y comunicaciones entre otros.

La catálisis ha jugado también un papel clave en la transformación del gas natural y el petróleo no solamente en combustibles de locomoción y para generar energía eléctrica, sino también para obtener moléculas que se utilizan en la fabricación de productos químicos como por ejemplo: polietileno, polipropileno, fibras sintéticas, detergentes y medicamentos, entre muchos otros. Hoy, guiados por principios de sostenibilidad, los catalizadores y fotocatalizadores nos permiten transformar materias primas renovables como la biomasa en combustibles y productos químicos, o la luz solar en energía eléctrica. Son los catalizadores en su concepto más amplio los que nos permiten también convertir CO₂ en metanol y, a partir de este, en combustibles líquidos y productos químicos. Más aún, mediante catalizadores convertimos residuos y emisiones de gases, muchas veces perjudiciales para nuestra salud o el medio ambiente, en productos inocuos o incluso en productos reciclables. Vemos pues que la catálisis y los catalizadores son pilares básicos en lo que se denomina química sostenible y química verde.

Si aceptamos esta afirmación, la pregunta sería cómo diseñar de manera racional catalizadores sólidos activos y selectivos. Para responder a esta pregunta intentamos en primer lugar comprender cómo ocurren a nivel molecular las reacciones químicas que queremos catalizar, con el fin de racionalizar la naturaleza de los centros activos requeridos.

Así, estudiamos los mecanismos de las reacciones mediante técnicas espectroscópicas que nos permiten, en algunos casos, “observar” las especies reactivas en la superficie del catalizador y seguir su evolución con el tiempo de reacción. Combinando los estudios espectroscópicos con estudios cinéticos, de modelización molecular y caracterización físico-química de la superficie del material y su evolución durante la reacción, intentamos determinar la naturaleza de los centros activos que deberíamos introducir en el sólido para llevar a cabo la reacción química



de manera selectiva. Sin embargo, en nuestro diseño de catalizador, pretendemos ir más allá de la generación de centros activos. Para ello introducimos éstos en estructuras, preferentemente cristalinas, con poros y cavidades del tamaño de los reactivos que permiten llevar a cabo la reacción en un espacio confinado. De esta manera, los catalizadores podrán no sólo actuar como tamices moleculares, seleccionando la o las moléculas de reactivo que difundirán a través de los poros, sino que además, por medio del tamaño y forma de las cavidades del catalizador, podremos seleccionar estados de transición no solamente mediante factores geométricos, sino también por factores entálpicos y entrópicos. Para conseguir estos objetivos hemos centrado una gran parte de nuestras investigaciones en el desarrollo de catalizadores zeolíticos.

Las zeolitas son silicatos nanoporosos con estructura cristalina bien definida que nos permiten racionalizar la manera de introducir los centros activos. Nos permiten, además, simular nuevas estructuras termodinámicamente posibles y llevar a cabo modificaciones virtuales en su composición y estructura para adaptarlas a la reacción deseada. Llegados a este punto el problema sería como sintetizar la zeolita adecuada.

En la actualidad, la metodología utilizada en el campo de las zeolitas como catalizadores consiste en primer lugar en la síntesis de nuevas estructuras mediante la utilización de agentes directores, formados por moléculas orgánicas (molécula plantilla). A continuación, se determina la estructura cristalina del silicato y por ende su topología de canales y cavidades, generando de esta manera un banco de zeolitas con estructura conocida.

Cuando los investigadores deciden catalizar una reacción determinada utilizan el banco de zeolitas, preseleccionando, entre las estructuras existentes, aquellas que por la forma y dimensiones de los canales y cavidades podrían ser adecuadas para llevar a cabo la reacción deseada. Finalmente, se ensayan todas las zeolitas preseleccionadas con la esperanza de que, al menos una de ellas pueda ser catalíticamente adecuada. Nosotros hemos seguido esta metodología de trabajo sintetizando unas 70 nuevas estructuras y descubriendo nuevas reacciones catalizadas por zeolitas. Sin embargo, parece evidente que la metodología de síntesis inespecífica de zeolitas, seguida de los ensayos mediante prueba y error en distintas reacciones, no es el sistema más eficiente, resultando en muchos casos lento y tedioso.

Así pues, en una primera aproximación al problema, tratamos de acelerar el descubrimiento de nuevas estructuras y los ensayos de reactividad requeridos para mostrar sus posibilidades catalíticas. Con este fin desarrollamos métodos y equipos propios de alta producción (High-throughput, en inglés). Quiero señalar que en ningún caso seguimos procedimientos de química combinatoria en nuestros estudios, sino que siempre nos basamos en hipótesis químico-físicas. Los métodos y equipos desarrollados nos han permitido ser, probablemente, el grupo académico más productivo, introducir nuevos conceptos en el campo y competir con las



empresas líderes del sector a las que les hemos licenciado metodología, equipos y nuevas estructuras zeolíticas.

A pesar de los éxitos obtenidos combinando nuevos conceptos y técnicas avanzadas, éramos conscientes de que seguíamos utilizando, aunque de manera más eficiente, la metodología de prueba y error.

Recientemente, hemos intentado romper este paradigma, planteándonos los siguientes desafíos:

-Síntesis “a priori” de una zeolita para una reacción determinada.

-Localización del centro activo en un lugar predeterminado de la estructura de la zeolita y que consideramos el sitio más adecuado desde el punto de vista de su actividad catalítica.

Con respecto a las síntesis “a priori” de zeolitas para aplicaciones catalíticas, nos hemos basado en la idea de que el objetivo último es diseñar una estructura zeolítica que minimice la energía de activación del estado de transición de la reacción mediante interacciones electrostáticas y de fuerzas de dispersión entre el estado de transición de la reacción y la estructura de la zeolita. Para conseguir ese objetivo, nos hemos inspirado en el concepto de anticuerpos catalíticos y hemos diseñado agentes directores de estructura orgánicos (moléculas plantilla) que mimetizan el estado de transición de la reacción a catalizar. Esta molécula plantilla conduciría a una estructura zeolítica capaz de maximizar las interacciones electrostáticas y de Van der Waals entre el estado de transición de la reacción y el catalizador. Además, la carga positiva en la molécula plantilla que mimetiza el estado de transición de la reacción, compensaría la carga negativa en la red de la zeolita, localizando de esta manera el centro catalítico en el lugar estructuralmente deseado para llevar a cabo la reacción. La concesión de una Advanced Grant del ERC, ha permitido desarrollar el concepto. Los primeros resultados han sido muy positivos tanto desde el punto de vista fundamental como aplicado. Hemos abierto una nueva línea de investigación, que ha despertado el interés de las empresas líderes del sector.

Puedo decir que nuestros mejores resultados han sido posible gracias a la existencia de un grupo multidisciplinar de investigación. Lo que somos hoy, lo decidimos y empezamos hace casi treinta años y el Instituto de Tecnología Química, así como el Departamento de Química Orgánica y el Instituto Universitario de Química Fina y Nanoquímica al que se incorporan hoy investigadores más jóvenes, no arrancaron con los medios materiales y de conocimiento que ellos encuentran hoy. Ha habido otros investigadores antes que ellos, los cuales con su esfuerzo, generosidad y conciencia de equipo han creado, casi de la nada, lo que hoy existe. Nada se nos es debido. Tenemos la obligación de luchar por lo que queremos, respetando a



quienes nos han precedido en el esfuerzo. Solamente si continuamos preguntándonos qué podemos hacer por el Instituto o el grupo y no únicamente qué ventajas y beneficios podemos obtener, conseguiremos continuar y mejorar la labor de los que nos precedieron.

No quiero terminar sin referirme a la función social de la universidad y de los centros públicos de investigación. En lo referente a la formación de los alumnos, nuestra obligación no consiste solamente en formar buenos profesionales para que triunfen en sus respectivos campos de especialización. Debemos ser maestros que transmitan conocimientos y principios para que nuestros jóvenes alcancen una formación integral como seres humanos libres y conscientes de su responsabilidad social. Debemos ser investigadores que despierten en nuestros jóvenes la curiosidad y capacidad para plantearse preguntas y desarrollar metodologías para resolverlas, generando de esta manera nuevos conocimientos. Pero debemos ir un paso más allá. Debemos transmitirles la cultura de la innovación, iniciativa y espíritu emprendedor. Debemos transmitir claramente el mensaje de que cuando abandonen la burbuja de la universidad y de los centros públicos de investigación, serán fundamentalmente los profesionales con buenas ideas y pasión, los que con trabajo duro y perseverancia van a ser capaces de mejorar y cambiar la sociedad.

En mi caso, considero como parte de mi labor, transmitir a los míos la pasión por la investigación bien hecha y conducirlos hasta el umbral de su propio desarrollo.

Finalmente considero que forma también parte de nuestras obligaciones ser agentes activos y críticos de lo que ocurre en nuestra sociedad. En los tiempos convulsos que vivimos en España es necesario que insistamos en lo obvio.

En ciencia no existe la ideología única e inamovible, debemos discutir abierta y rigurosamente. Para ello necesitamos que nuestros resultados sean reproducibles por cualquiera de nuestros colegas, pero nos apoyamos también en los errores para avanzar. Independientemente de la nacionalidad, credo religioso o idea política, la ciencia se construye apoyándonos en los descubrimientos de los demás. De esta manera, mediante discusiones abiertas y rigurosas, basándonos en el conocimiento y la razón, es como se avanza en la ciencia. Pero si esta metodología se ha comprobado que es exitosa, ¿por qué no la aplicamos para construir y gobernar nuestra sociedad?. Tal vez porque no siempre disponemos de información veraz y contrastable para poder discutir de manera racional. Estoy seguro de que si la información no se tergiversara para magnificar diferencias o incluso inventarlas, sería más fácil llegar a acuerdos necesarios en una sociedad como la nuestra con distintas sensibilidades políticas. Estoy seguro de que de esta manera los ciudadanos seríamos capaces de llegar a acuerdos para mantener derechos irrenunciables de: educación y salud pública, bienestar social, justicia social, cultura e investigación. Es también nuestro deber mantenerlos frente a las tentaciones de algunos dirigentes y de los codiciosos que sólo buscan el beneficio personal o cortoplacista.



Cuando se pierde el principio de solidaridad y nos amparamos en los privilegios y superioridad de la tribu, perdemos nuestra dimensión humana universal y despreciamos el sacrificio de tantos ciudadanos que han dado su vida por conseguir una sociedad más justa. Debemos ser más críticos con aquellos dirigentes que se han transformado en expertos en marketing y en el dominio de los medios de comunicación, muchas veces con el fin de introducir sesgos, cuando no manipularla.

Señor Rector, Sra. Presidenta del CSIC, Profesor Fernández de Buján, Señor Decano, Queridos José María, María Ángeles y Alberto, distinguidos y distinguidas colegas, señoras y señores. Recibo el reconocimiento que me otorga la Universidad de Córdoba en nombre de todos y todas las que han sido sostén y motor en mi vida. Los maestros, colegas y colaboradores de los que he aprendido, todos los miembros pasados y presentes del ITQ que siempre me han apoyado, incluso cuando me equivocaba o cuando podían sentirse incomprendidos. A los amigos y amigas que se han alegrado y compartido los éxitos y han estado a mi lado en los fracasos, y sobre todo a mis dos mujeres Brisa y Anaïs quienes con su amor, apoyo, y alguna bronca, han hecho que mi vida fuera más plena. Finalmente gracias a todos los presentes por compartir conmigo estos momentos.

6 de marzo de 2018