

Octavio Novaro Peñalosa

HACIA UNA TEORÍA DE LA CATÁLISIS

CONVERGENCIA DE
CONCEPTOS DE LA FÍSICA, LA
QUÍMICA
Y LA BIOLOGÍA
(DISCURSO)

MARCOS MOSHINSKY
RESPUESTA



EL COLEGIO NACIONAL

HACIA UNA TEORÍA DE LA CATÁLISIS
CONVERGENCIA DE CONCEPTOS DE LA FÍSICA,
LA QUÍMICA Y LA BIOLOGÍA

Octavio Novaro Peñalosa

HACIA UNA TEORÍA DE LA CATÁLISIS

**CONVERGENCIA DE CONCEPTOS
DE LA FÍSICA, LA QUÍMICA
Y LA BIOLOGÍA
(DISCURSO)**

MARCOS MOSHINSKY
RESPUESTA



EL COLEGIO NACIONAL
México, 1995

Primera edición: 1995

D. R. © 1995. EL COLEGIO NACIONAL
Luis González Obregón núm. 23, Centro Histórico
C. P. 06020, México, D.F.

ISBN: 970-640-028-1

Impreso y hecho en México
Printed and made in Mexico

PALABRAS DE SALUTACIÓN

Leopoldo Solís

El Colegio Nacional tiene el honor de recibir esta noche al ilustre doctor Octavio Novaro Peñalosa, para que figure como uno de sus miembros. La obra del maestro Novaro Peñalosa es muy extensa y diversificada en distintas áreas del conocimiento, como nos lo dirá el doctor Marcos Moshinsky, quien contestará el discurso de ingreso.

Su obra científica y de investigación esta consignada en 164 publicaciones, en las que ha colaborado con los más destacados maestros mexicanos y extranjeros. No se puede soslayar su obra de divulgación consignada en 127 títulos.

El doctor Octavio Novaro Peñalosa ha sido distinguido con importantes premios en homenaje a su labor dedicada al conocimiento, como lo son el Premio de Ciencia Exactas que recibió en 1977, el Premio de Ciencias y Artes, en 1983, y el Premio de Ciencias de la UNESCO, en 1993.

Actualmente es director del Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Ha dejado huella en la formación profesional de 30 licenciados y doctores en física y ha prestado servicios eminentes a la Universidad Nacional Autónoma de México y a otras instituciones en cargos administrativos.

Este impresionante testimonio curricular, le otorga méritos suficientes para pertenecer a este Colegio, que lo recibe con la emoción y el deseo de que el doctor Octavio Novaro Peñalosa enriquezca, aún más, la vida espiritual de México.

HACIA UNA TEORÍA DE LA CATÁLISIS
CONVERGENCIA DE CONCEPTOS DE LA FÍSICA,
LA QUÍMICA Y LA BIOLOGÍA

Octavio Novaro

INTRODUCCIÓN

Agradezco profundamente a todos los miembros de El Colegio Nacional haberme elegido para ingresar a esta importante Institución dedicada al desarrollo de la cultura en México. Voy a evitar referirme por nombre a nadie en esta presentación para no cometer alguna omisión injusta, pero a mis maestros y colegas científicos que propusieron la candidatura les expreso mi gratitud. Así como también a los miembros del ala humanística y de las artes en este Colegio que la apoyaron. Algunos conocieron a mi padre y tal vez por eso me otorgaron su confianza, espero no defraudarla.

Basaré esta presentación en mi experiencia personal durante treinta años como investigador en la UNAM. Hablaré del presente y el pasado; pero también me atreveré a proponer ciertos escenarios

sobre algunos aspectos de la ciencia del futuro, la cual será, en mi opinión, fuertemente interdisciplinaria y en ella deberán converger conceptos aparentemente muy distintos, nacidos de las estrategias tan diversas que los físicos y matemáticos, los químicos y los biólogos (y tal vez hasta los sociólogos y psicólogos) han desarrollado para crear modelos inteligibles del complejo mundo que nos rodea. Me basaré en ejemplos de mi propia carrera donde tuve que compaginar una formación fuertemente matemática con los retos y necesidades que planteaba uno de los campos más prácticos de la química industrial: *la catálisis*.

Después de terminar el doctorado, culminando mis estudios que siempre se desarrollaron en México, tuve que decidir si realizaba una estancia postdoctoral en el extranjero. En vez de salir decidí pasar un año y medio en el Instituto Mexicano del Petróleo que recién nacía gracias a la visión de sus fundadores y la participación de varios distinguidos científicos que yo admiraba. A pesar de que yo recomiendo fuertemente a mis estudiantes de doctorado salir al extranjero después de obtener su grado en México, debo confesar que no me arrepiento de mi elección personal. Como muchos en el IMP de los primeros tiempos, me vi ante la necesidad de extraer preguntas científicas de entre el complejo mundo de la industria petrolera. Escogí el tema de catálisis que representaba un impor-

tante renglón en la economía de PEMEX. Todos los procesos petroleros dependían de los misteriosos y costosos catalizadores. Lo mismo para refinar gasolinas que para producir polímeros y productos de química fina se requería agregar ciertas partículas en cantidades pequeñísimas (unas pocas partes por millón entre las sustancias que contenían los

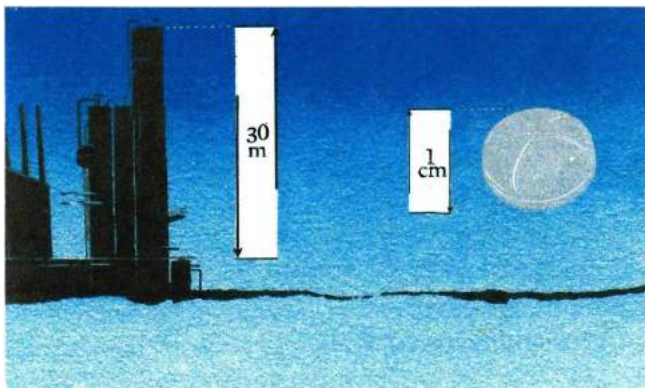


Fig. 1. Tamaños relativos de una planta petroquímica y de su “cerebro y corazón”, un pequeño catalizador.

reactores) pero que bajaban los costos (en dinero, en tiempo, en energía) en factores de 100 o más. Esas pequeñas partículas contenían metales de transición y sobre todo un *know-how* de alto costo, pero compensaban ese costo inicial al abaratar todo el proceso.

Desafortunadamente, para los expertos en la catálisis química entender cómo sucedía el fenó-

meno de la catálisis era un problema secundario. Para ellos lo importante era dedicarse a buscar, mediante técnicas empíricas consistentes en probar, desechar y volver a probar, catalizadores que funcionaran. Decían francamente que la catálisis era más un arte que una ciencia, orgullosos de sus habilidades basadas sólo en experiencia e intuición. En vano busqué en la literatura de fines de los sesentas cuál era el punto de vista de los científicos sobre la catálisis. Mi dilema era particularmente complicado por mi formación de físico teórico, acostumbrado a las leyes fundamentales y rigurosas. Pronto tuve que aprender el valor de los modelos cualitativos y las aproximaciones empíricas utilizadas para los complejos problemas de la química y la biología.

Permítanme explicar mi situación. Yo partía de las leyes rigurosas de la física. Ejemplifiquemos con la ecuación fundamental del mundo atómico: la ecuación de Schrödinger. Prometo solemnemente no discutir en esta plática ni las matemáticas ni los métodos de resolver las ecuaciones, so pena de perder la atención de los no especialistas. Sólo diré que resolviendo esta ecuación obtenemos la herramienta más valiosa de los físicos para describir la naturaleza: la energía, los cambios de energía. Cuando se estableció esta ecuación uno de los más grandes físicos de este siglo, Dirac, pronunció la

Ecuación de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = i \frac{\hbar}{4\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi$$

"Toda la Química y gran parte de la Física han quedado, en principio, resueltas."

P.A.M. Dirac 1930

Fig. 2. Ley fundamental de la física de los átomos y moléculas.

siguiente frase: *"toda la química y gran parte de la física han quedado, en principio, resueltas"*. Un joven recién doctorado partía entonces con una gran confianza a resolver el mundo de la catálisis química. Veamos a que se enfrentaba.

El fenómeno catalítico fue descrito por Berzelius hace 160 años. La palabra catálisis tiene la misma raíz que "catástrofe"; sin embargo, veremos que resulta todo lo contrario. Veamos un ejemplo, supongamos que un individuo tiene sed y descubre que tiene a la mano dos tanques, uno de oxígeno (O₂) y otro de hidrógeno (H₂). Sabiendo que la fórmula del agua es H₂O, concluye correctamente que mezclando ambos gases en una campana al vacío se formará agua. La eficiencia del proceso sin

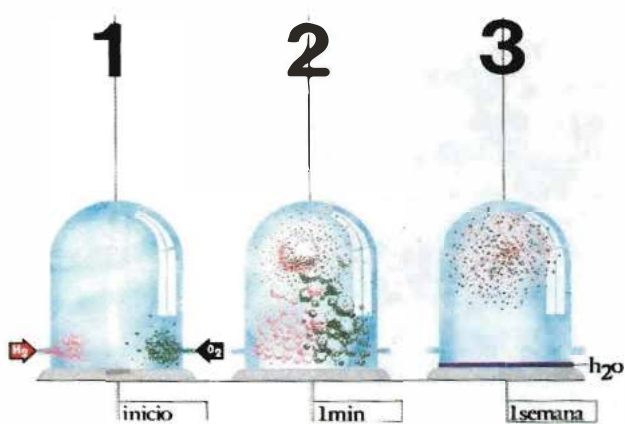


Fig. 3. Reacción de los gases O_2 y H_2 para formar agua (H_2O).

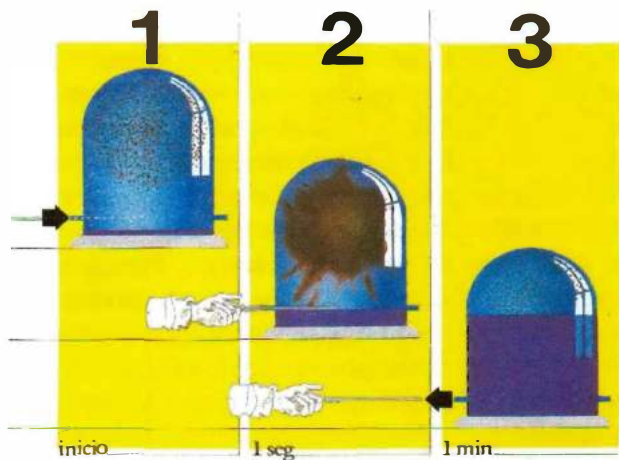


Fig. 4. La misma reacción de la fig. 3, ahora acelerada por el catalizador: una pequeña barra de platino.

embargo no es suficiente para calmar su sed, puesto que una semana después de haber mezclado los gases sólo se han formado unas pocas gotas de agua. Por otro lado, si acerca una a barrita de platino a la mezcla de H_2 y O_2 observará dos cosas, una explosión (que implica que una cantidad de energía ha sido súbitamente liberada) y además que casi toda la mezcla de gases se ha convertido en el líquido deseado: agua. Esto sucede en forma casi instantánea. La barra de platino puede ser introducida e inmediatamente retirada. Al verla notaremos *que no ha cambiado en absoluto* excepto tal vez unas gotas de agua sobre ella que podemos secar. El platino no se afectó y sin embargo ¡qué efecto tuvo sobre la mezcla de gases! Lo que sin la “visita” de la barra metálica era un proceso lentísimo, pasó a ser instantáneo. El producto deseado, agua en este caso, que sólo se podría obtener con un gasto enorme de tiempo (o de energía y dinero por ejemplo calentando la campana para acelerar la reacción), se obtuvo sin retardo ni gasto (ya que el platino *no* se desgastó).

Evidentemente el agua no es un producto de alto valor agregado, pero sí lo son la gasolina, el polietileno o tantos otros que se producen usando catalizadores en procesos a veces más complicados pero esencialmente equivalentes al que acabamos de describir. Maravilloso pero misterioso, a pesar

de que “toda la química” haya sido resuelta desde los tiempos de Dirac.

En realidad los químicos no “inventaron” la catálisis, tal como los físicos no inventaron la fusión nuclear como nueva fuente de energía... que vienen usando las estrellas desde las edades tempranas del universo. Así, la catálisis la venían utilizando los seres vivos desde mucho antes de Berzelius. Todos los procesos vitales usan unos catalizadores llamados enzimas y que son infinitamente más eficientes que nuestros mejores catalizadores industriales. La respiración, la digestión, la reproducción sexual, la transmisión nerviosa, etc., están conectados en una u otra forma con la catálisis enzimática. Por ejemplo, la digestión de un pedazo de pan tardaría más de 24 horas si no fuera acelerada por enzimas especializadas.

Para pensar en 1970 en establecer una teoría del fenómeno catalítico, se requería ser irreflexivo y francamente temerario. Porque se precisaba entender cómo se introducían cambios en los cambios, donde los segundos eran los cambios que definen toda reacción química (es decir, el proceso de cambio que lleva de los reactantes a los productos finales de la reacción, p. ejem. de $H_2 + O_2$ hasta H_2O) y los primeros serían los cambios que producirá la presencia del catalizador en el proceso químico de la reacción. Por esos años el principal libro de texto llamaba a las reacciones la “última

Thule” de la química teórica, según la expresión de los antiguos romanos para la última tierra conocida. Agregar a las reacciones el efecto del catalizador ciertamente llevaba a lo desconocido. Sin embargo, para las reacciones normales ya se tenía claro que la conexión con las leyes básicas era a través de los cambios energéticos. En efecto, cada vez que se rompe una ligadura química (p. ejem. H-H y O-O) la energía aumenta pero al formarse ligaduras nuevas (p. ejem. H-O-H) vuelve a disminuir. Pero hay muchas alternativas (p. ejem. puede romperse *primero* H-H y después O-O o viceversa) y estas alzas y bajas en la energía definen un espacio en muchas dimensiones llamadas superficies de potencial. El resultado de resolver la ecuación de Schrödinger aun en casos de reacciones muy sencillas corresponde a un mapa en relieve con altas cimas y valles profundos. Los segundos corresponden a estructuras químicas de relativa estabilidad y las montañas y cerros a situaciones inestables. En realidad el símil de un mapa en relieve es un buen símil, aunque más allá de los casos más sencillos, el mapa químico tiene mucho más de las tres dimensiones que tienen mapas en relieve de la Tierra. Pero evidentemente un mapa así tiene una gran utilidad pues nos muestra el camino óptimo entre un punto de salida y otro al que queremos llegar. Supongamos que describimos dos procesos en forma paralela, por un lado



Fig. 5. Mapa en relieve idealizado del camino que Cortés recorrió entre el valle de la Antigua Veracruz al valle del Anáhuac.

partimos de un valle en la Antigua Veracruz, con Cortés, y paralelamente partimos del valle de energía de los gases iniciales H_2 y O_2 . Queremos llegar, por un lado, al Valle del Anáhuac, y por otro, al valle de energía de las moléculas de H_2O . Podemos seguir varios caminos pero si elegimos uno que pase por la cresta del Popocatepetl o del Iztac-cíhuatl gastaremos mucho más energía que por el camino óptimo, o sea el Paso de Cortés. Usar ese camino permite que ahorremos energía. Un “paso de montaña” en las superficies de potencial, se llama estado intermedio y representa un punto crítico en la reacción pues desde allí se puede ir hacia adelante o hacia atrás. Los estados intermedios no pueden ser observados. Son indetectables experimentalmente porque son inestables por definición. Y ahí es donde el cálculo teórico puede dar información inaccesible de otro modo. La

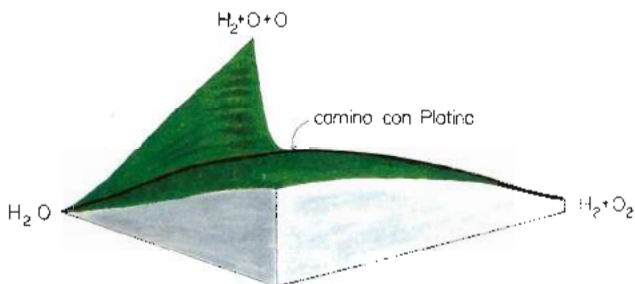


Fig. 6. Mapa en relieve simplificado del camino desde el valle de los reactantes (H_2 y O_2) al valle de los productos (H_2O).

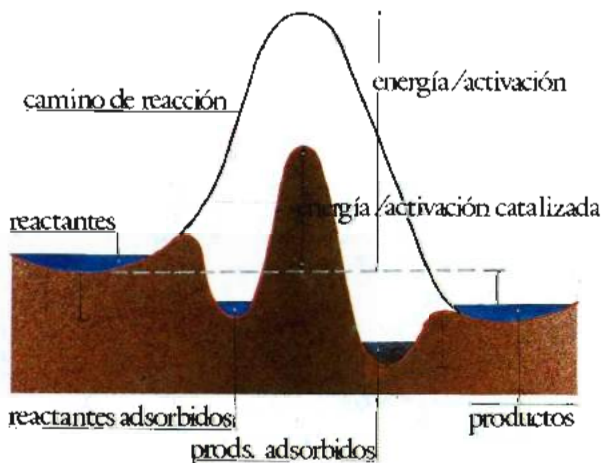


Fig. 7. Corte simplificado de la superficie de potencial de la figura 6 mostrando el efecto del catalizador de platino bajando la altura del "Paso de Cortés", o sea la energía de activación de la reacción $H_2 + O_2 \rightarrow H_2O$.

altura del “Paso de Cortés” a partir de la Antigua Veracruz, o más bien su equivalente químico, también puede ser predicha teóricamente, y esta altura es importantísima y es llamada la energía de activación. Ésta es la energía mínima necesaria para obtener los productos deseados. Lo que el platino hace es reducir esa energía aún más, como si construyera un túnel por abajo del “Paso de Cortés”, lo que acelera la reacción.

Lo que introdujimos como novedad en México fue incluir el catalizador junto con las moléculas reaccionantes en el cálculo. Veamos algunos ejemplos sencillos. La superficie de potencial de la acti-

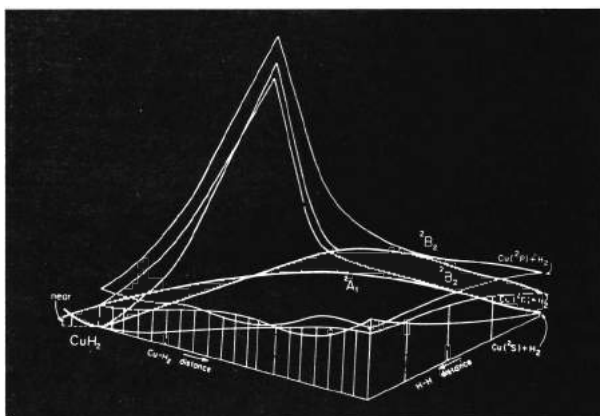


Fig. 8. Superficies de potencial y camino de reacción fotocatalítica de cobre con hidrógeno.

vación de moléculas pequeñas por cobre que aparece en la figura es un poco complicada porque implica estados excitados. De hecho es más que una reacción catalítica; es una reacción fotocatalítica, la primera de este tipo que se ha calculado. Lo importante es que vemos un mapa en relieve que muestra un "paso de Cortés" razonable que permite romper moléculas pequeñas como H_2 y CH_4 con bajo costo de energía. De hecho la alta montaña en la esquina superior izquierda representa la energía necesaria para romper la molécula cuando el cobre no cataliza la reacción (es decir, cuando Cu se aleja a distancia infinita). Esto es la clave del proceso catalítico y en el fondo es evidente. Por definición al iniciarse la reacción (en el valle inicial o valle de los reactantes) y al terminar (en el valle de los productos) el catalizador queda inalterado, o sea, su contribución a la energía es igual a una constante. En las etapas intermedias en cambio, interacciona con las moléculas de la reacción y altera la energía que tendría la reacción no catalizada. De hecho baja la energía del complejo intermediario, o sea, produce un paso de Cortés de altura más accesible. El descubrimiento de que un metal barato como el cobre puede liberar la energía del metano o gas natural tiene enorme potencial práctico.

El gas natural aparece acompañando a los yacimientos de petróleo y actualmente se quema en la atmósfera en los campos petroleros, sin embargo,

seguramente será una de las fuentes más prometedoras de energía del siglo XXI.

Otro ejemplo de una superficie de potencial es una reacción sencilla de captura de H_2 por paladio. Esta reacción no había sido estudiada experimentalmente porque aparentaba violar un dogma químico. H_2 es una molécula muy estable y el paladio presenta una capa cerrada (técnicamente una capa $4d^{10}$). El dogma decía que las capas cerradas son inertes (el ejemplo típico son los gases nobles, He, Ne, Ar, Kr, etc). Nuestra superficie de potencial en cambio mostraba que el paladio atraía espon-

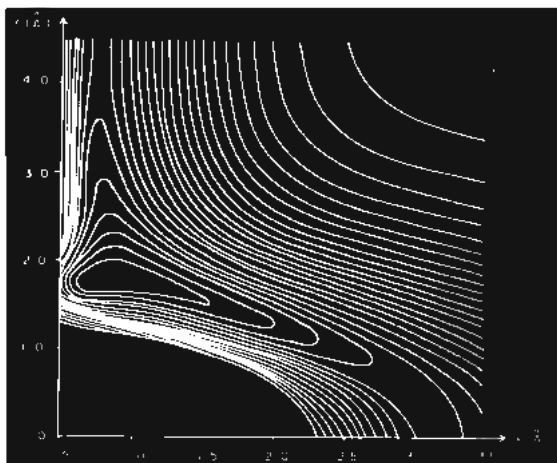


Fig. 9. Superficie de potencial de captura de hidrógeno por platino.

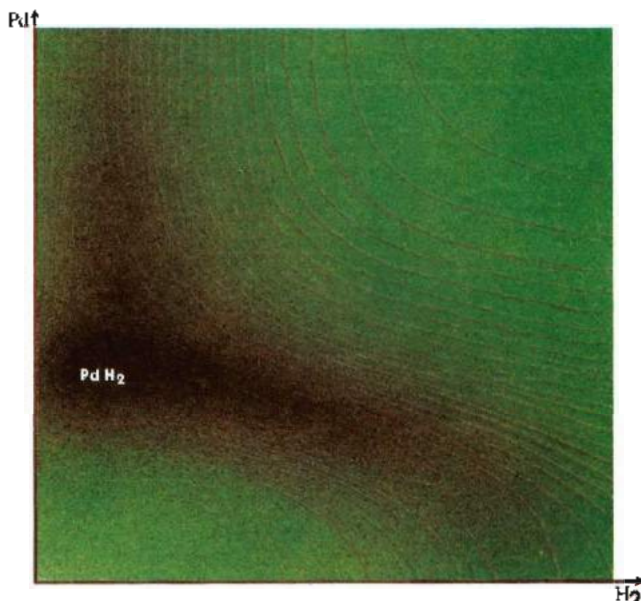


Fig. 10. La misma superficie de la fig. 9, vista como una tersa mesa de billar con una buchaca en que se captura el PtH₂.

tánea y eficientemente al H₂. La comprobación experimental fue inmediata. En cuanto al dogma hemos hecho varios estudios sobre otros metales de transición (que son precisamente los mejores catalizadores) y sistemáticamente hemos encontrado que los estados más activos en catálisis son los que tienen su capa d más llena. En catálisis un nuevo dogma parece estarse estableciendo. Volviendo a la captura de H₂ por paladio, también tiene importantes consecuencias prácticas. El

hidrógeno tiene varias características que lo hacen parecer la fuente ideal de energía para el futuro. Libera muchísima energía al romperse y es uno de los elementos más abundantes y baratos en la tierra pero... es muy explosivo. La esperanza será almacenarlo en un metal como combustible sólido. El mejor candidato: *el paladio*.

Desde un principio me había fijado una meta, resolver teóricamente un proceso catalítico real, con toda la complejidad y riqueza que requiere la industria química. Escogí un "clásico", la catálisis de Ziegler-Natta que ha permitido toda la industria de los plásticos al producir, usando como catalizadores grandes complejos moleculares de titanio y aluminio, la polimerización de etileno y propileno. Se crean largas cadenas poliméricas que son la

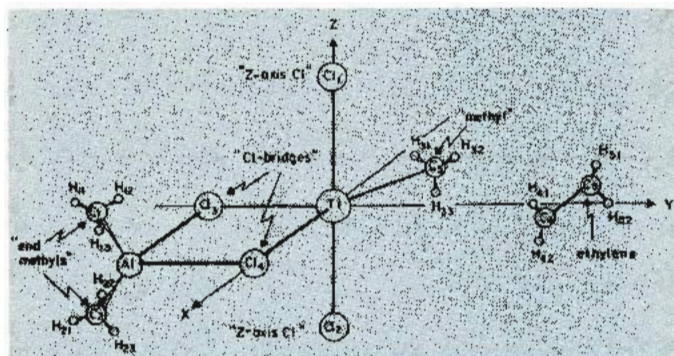


Fig. 11. Estructura del famoso catalizador Ziegler-Natta con los átomos que lo componen identificados (en inglés).

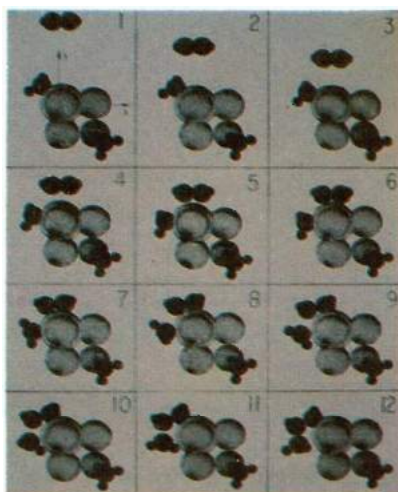


Fig. 12. Evolución de la polimerización por el mismo catalizador de la fig. 11 donde ahora los átomos aparecen como esferas, la mayor es un átomo de titanio rodeado de cuatro cloros, (esferas medianas), un aluminio (ligeramente menor) y los carbonos e hidrógenos más pequeños.

base de muchísimos plásticos, desde los que usamos para las bolsas de compras, hasta plásticos de alta calidad, para los viajes espaciales. Resolver una reacción tan complicada y con tantísimos átomos requirió dos cosas. La primera entender e incorporar todos los modelos e hipótesis que los químicos habían usado para racionalizar sus resultados. La segunda, formar un equipo internacional que incluyó laboratorios de la IBM en California y Nueva York y también en Italia, en particular la compañía

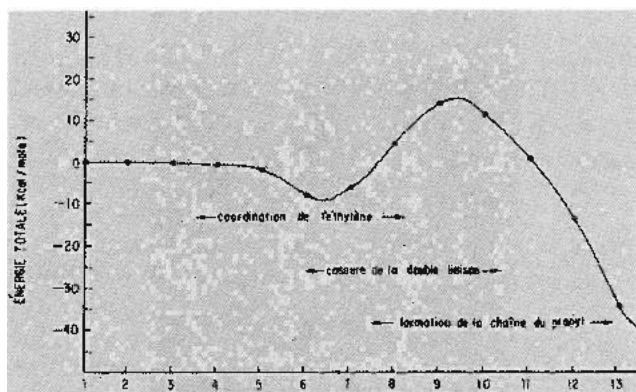


Fig. 13. Camino a la reacción catalítica de Ziegler-Natta calculado teóricamente. La energía sube o baja según se rompen y forman ligaduras. La energía baja un poco al capturar el etileno, sube al romperlo y vuelve a bajar al formar polietileno.

Donegani donde el mismo Natta había inventado el catalizador que le valió el Premio Nobel. El objetivo era tener el máximo potencial computacional para nuestro estudio, porque iba a tener que ser el más grande y complejo cálculo de toda la historia de la física molecular y la química cuántica, aun mayor que el estudio del par guanina-citosina, el primer cálculo sobre el ADN. Más allá de la complejidad de nuestro cálculo lo importante fueron los resultados. La curva que aquí se muestra es el *camino de reacción* o sea la trayectoria óptima sobre la superficie de potencial de la polimerización catalizada. Los números clave que obte-

nemos del camino de reacción son: las alturas relativas de los valles de reactantes (las moléculas de etileno individuales) y de productos (la cadena de polipropileno) que muestra que el proceso libera energía por ser más bajo el segundo que el primero. También nos da la energía de captura del etileno por el catalizador y la importantísima energía de activación, que nos predice el costo de la reacción, costo bajísimo gracias al catalizador. Todos estos números han sido hasta la fecha confirmados con toda precisión por el experimento, por lo que no hay razón de hacer nuevos cálculos... afortunadamente.

En los últimos tiempos hemos creado un equipo teórico-experimental que nos ha permitido construir y patentar nuevos catalizadores partiendo de estructuras predichas teóricamente por nosotros. También, como dijimos antes, hemos hecho los primeros cálculos de procesos fotocatalíticos en los cuales un papel tan importante como el del catalizador lo juega la luz. Este campo tiene enorme interés científico y también potencial práctico y además nos acerca a fenómenos biológicos como la fotosíntesis.

Antes de hablar de algunos posibles escenarios para el futuro, veamos qué hemos aprendido. Apparentemente hemos seguido la proposición de Dirac: "la química está en principio resuelta...". A partir de una ley física fundamental hemos avanzado

hacia un proceso químico altamente complejo: la catálisis. Recordemos sin embargo, que para tener éxito hemos debido incorporar a cada paso los conceptos y modelos que los químicos han desarrollado para racionalizar esos procesos.

Especulando acerca de la ciencia del próximo milenio, una pregunta válida sería: ¿podrá este proyecto partir de leyes fundamentales para entender problemas mucho más complejos aun como los que presentan los seres vivos y aun los seres inteligentes? Creo que una respuesta positiva es posible si admitimos que deberemos incorporar en el proceso una serie de conceptos y propiedades que actualmente *no* están en las leyes fundamentales. O sea que podremos esperar no sólo que la biología cambie por su interacción con la física, sino que ésta sea profundamente modificada en el proceso de adecuarse a las necesidades de la biología.

Recuerdo una experiencia que tuvimos algunos estudiantes de física al final de nuestra carrera. Pudimos conocer a un prestigiado biólogo inglés que sustentó unas conferencias en México. Lo bombardeábamos con preguntas e intercambiábamos ideas. Luego supimos que pasaría un año sabático en alguno de los institutos de ciencias de la vida en la **UNAM**. Él pidió a sus anfitriones que le permitieran que ocupara no un cubículo en ese instituto sino en el de Física. De hecho nos solicitó

un escritorio en nuestro cuarto de estudiantes. Esto nos halagó y despertó nuestra curiosidad. Un día le preguntamos sobre su elección y nos contestó: “es que yo admiro mucho a los físicos”. Nos sentimos muy halagados y continuó: “son muy listos” (y sentíamos que íbamos a explotar de orgullo). Pero remató: “son tan listos que acapararon todos los problemas más sencillos de resolver”, lo cual desinfló rápidamente nuestros egos gremiales. Mi maestro clasifica los problemas de la física en dos categorías: los triviales y los imposibles de resolver, y agrega: “el trabajo de los físicos es pasar tantos de los segundos hacia la categoría de los primeros como sea posible”. La pregunta es si al resolver así los problemas los trivializamos.

Veamos por ejemplo: las leyes de la física tradicionalmente se establecen entre partículas sin estructura interna: puntos masa, puntos carga. La ley que gobierna los movimientos planetarios por ejemplo es igual si consideramos la interacción entre la tierra y el sol, entre la tierra y la luna o la luna y el sol. Además si consideramos simultáneamente el sistema tierra-sol-luna, las interacciones entre cada pareja de ellas se consideran inalterables. O sea, sólo tenemos que sumar las interacciones entre cada par y tendremos las interacciones entre los tres.

Los biólogos y los químicos saben que esto generalmente no sucede en los fenómenos que ellos

estudian. Por ejemplo: tanto en la molécula H_2 como en H_2O , hay dos átomos de hidrógeno contenidos. ¿Podremos suponer que la interacción entre los dos es la misma en ambas moléculas? Por supuesto que no, en H_2 se ligan con una fuerza muy poderosa y en H_2O los hidrógenos se repelen ligeramente. La presencia del átomo de oxígeno afecta su propia interacción. Veamos un ejemplo más trivial: imaginemos dos estudiantes universitarios platicando antes de un partido de fútbol, su plática sin duda está llena de puyas y bromas. Si se acerca a ellos un maestro que va a examinarlos el lunes siguiente, la forma como ellos se tratan entre sí va a cambiar, tratarán de sonar más intelectuales y educados. Pero si el que se acerca es un estudiante del Poli, nuevamente la relación entre los dos primeros cambia, al unirse para enfrentar al "rival" común. Y si en cambio la que se acerca es una guapa porrista, el cambio será que ahora ellos competirán entre sí fuertemente para la atención de la chica. Y cuando ya están dentro del estadio la relación entre los dos compañeros vuelve a cambiar, se diluye entre toda la tribuna que echa porras colectivamente; son dos puntos en un océano que los envuelve y uniformiza.

Estos cambios tan naturales en las interacciones "entre pares" por la mera presencia de un tercero no están generalmente en las leyes de la física. Se pueden introducir por supuesto, y ha sido uno de



Fig. 14. Caricaturas del efecto de tres cuerpos. Dos chicos interactúan entre sí en forma muy distinta dependiendo de quién se les aproxima.

los temas que más me han interesado durante mi carrera: los efectos no-aditivos o efectos de tres cuerpos. En mis esporádicas y modestas incursiones en temas de biología he comprobado que estos efectos pueden jugar un papel importante. La diferente acción anticancerígena de las drogas conteniendo cis-platino o trans-platino sobre las cade-

nas del ADN por ejemplo, puede entenderse en parte en base a ellas. El transporte de iones de litio, sodio, calcio o potasio en membranas biológicas se predice mal si no introducimos estos efectos no-aditivos producidos en las capas de hidratación de estos cationes, etc.

Me gustaría hablar de uno de los problemas más fascinantes de toda la ciencia, en mi opinión muy personal el más relevante para la investigación del próximo milenio: la morfogénesis. Pensemos en la célula elemental formada por la unión de un espermatozoide y un óvulo humanos. Inicialmente sólo es capaz de una sola e importantísima misión. Reproducirse constantemente generando copias idénticas de sí misma. Pero pronto, conjuntos de estas células individualmente idénticas empiezan a especializarse en órganos diversos del embrión. Conjuntos de células se organizan como tejido óseo, otras forman tejido hepático, otras se especializan como neuronas nerviosas, etc. La ciencia está empezando a ver cómo se puede entender esto en base al código genético común de las células individuales, teoría que en parte fue desarrollada por físicos que naturalmente se fueron al fenómeno individual. Me pregunto ¿no estaremos dejando afuera otros aspectos que van más allá de los individuos o las interacciones entre parejas de individuos? ¿Las células de la región hepática no sufrirán efectos *colectivos* distintos a las de la región ósea?

Tal vez así como la gente se comporta distinto en un estadio que en un salón de clase, así debemos concebir “campos” que nos permitan modificar nuestras leyes físicas para entender la morfogénesis. O lo opuesto, la carcinogénesis que a veces parece como si se regresara al crecimiento de las células en forma individual, como si se perdiera el control que el conjunto estableciera sobre sus miembros. Estas preguntas están sin duda mal planteadas y son producto de la ignorancia que por lo menos *este* físico demuestra ante los fenómenos biológicos, pero también tienen su origen en la enorme curiosidad que siento acerca de cómo será la física que sabrá extender y modificar sus leyes hacia los fenómenos de la vida.

Creo que en el siglo XXI la física aprenderá a incorporar nuevos conceptos y modelos que la acerquen a estas preguntas. Y en mi opinión, lo poco o mucho que los físicos contribuyan a que “la biología quede en principio resuelta”, resultará más trascendente para la física del futuro que el descubrir nuevos sabores y colores de los quarks. No me queda más que volver a agradecer a El Colegio Nacional por recibirme, a mis colaboradores, alumnos y sobre todo a mis maestros a quienes tanto les debo, a mi familia por su constante apoyo y a todos ustedes por su amable atención. *Muchas gracias.*

CONTESTACIÓN AL DISCURSO DE INGRESO DEL
DOCTOR OCTAVIO NOVARO COMO MIEMBRO
DE EL COLEGIO NACIONAL

Marcos Moshinsky

Es para mí un placer y un honor el recibir el día de hoy al Dr. Octavio Novaro Peñalosa como miembro de El Colegio Nacional. Durante treinta años he seguido su brillante trayectoria como estudiante graduado, joven investigador, profesor y científico maduro, y en todas esas actividades ha mostrado dos cualidades que no siempre van juntas: originalidad y responsabilidad. ¿Cómo pudieran definirse estas dos características? Para la primera se podría utilizar la siguiente analogía. En el principio del entrenamiento de un joven científico, éste se comporta en forma parecida al de una pared inerte contra la cual el profesor lanza la pelota del conocimiento. Inicialmente la pared parece ser de plastilina porque la pelota no rebota. Después se vuelve más rígida pero la pelota aparece a un ángulo que el profesor conoce de antemano. Pero un día la pelota del conocimiento regresa a un ángulo

completamente inesperado, lo que indica que la pared se ha convertido en un compañero de juego.

La originalidad consiste pues en atacar con éxito problemas desde un punto de vista novedoso, y llegar a conclusiones que revelan una nueva faceta del fenómeno.

La responsabilidad se caracteriza por el hecho no sólo de atacar problemas científicamente importantes, sino arredrarse por las dificultades que presentan, sino también por escoger entre ellos a los más relevantes en el medio social al que le toca a uno vivir.

Como mostraré mas adelante, tomando en cuenta la caracterización de originalidad y responsabilidad que se indica en los párrafos anteriores, éstas son cualidades que Octavio Novaro Peñalosa posee en grado sumo.

Pero hablemos ahora de sus estudios, investigaciones, y las muchas otras actividades que ha desarrollado a lo largo de su carrera profesional.

Después de la Escuela Primaria, pasó por la Secundaria #3, la Escuela Nacional Preparatoria todavía en su lugar ancestral de San Ildefonso y finalmente a la Facultad de Ciencias de la UNAM donde obtuvo su licenciatura, maestría y doctorado en los años de 1965, 68 y 69 respectivamente.

En la época en que Novaro realizó sus estudios de posgrado, se hacían en el país principalmente investigaciones en el campo de la física nuclear

teórica. Novaro estudió las técnicas matemáticas en que estaban basados esos estudios, pero una vez que las dominó, pensó en su aplicación en los campos de la física atómica y molecular, en los que nadie había incursionado anteriormente en México, dando así su primera muestra de originalidad. Inicialmente se interesó en lo que pudiéramos llamar caricaturas de átomos y moléculas cuyos espectros se podían evaluar exactamente y que le sirvieron para poner a prueba los métodos aproximados que se usan en el cálculo de átomos y moléculas reales. De estas consideraciones pasó a otras más fundamentales, en que aplica técnicas de teoría de grupos para entender el comportamiento periódico de los elementos químicos que empíricamente Mendeleev había encontrado en el siglo pasado. Sus extensas publicaciones sobre el tema son demasiado técnicas para ser expuestas aquí, pero contribuyeron notablemente a la comprensión más profunda de este importante fenómeno.

Después de doctorarse Novaro se interesó en otro problema inédito en México, que fue el del carácter no aditivo de las fuerzas intermoleculares, consistente en el hecho de que la presencia de un cuerpo más en el sistema no sólo agrega su interacción con los demás, sino que modifica las características de dichas interacciones. Sus ideas en este campo han tenido consecuencias prácticas en cúmulos atómicos, efectos de superficie, acción del

solvente y, muy particularmente, en la catálisis. Con esta última ya entramos en uno de los campos en que la actividad de Novaro ha sido más relevante.

En efecto, el fenómeno de catálisis, al que Novaro se refirió en su plática anterior, es uno de los conocimientos más importantes. Su ejemplo de que una barrita de platino puede acelerar en forma increíble la combinación de hidrógeno y oxígeno para formar agua, parece más cosa de alquimia que de química. De hecho se podría decir que una de las aportaciones más significativas de la actividad de Novaro fue precisamente el de transformar en ciencia lo que era antes magia, en gran parte del extenso campo de la catálisis.

Quisiera enfatizar, en esta respuesta a la presentación de Novaro, su sentido de responsabilidad, que lo llevó a adentrarse en el problema de la catálisis tanto por el desafío que implicaba, como por su importancia para la industria petrolera en México. Durante los años de 1969-1971 cuando estuvo de tiempo completo en el Instituto Mexicano del Petróleo (IMP) y de 1971-1984 en que se desempeñó como asesor del mismo, realizó múltiples investigaciones en el campo de la catálisis con muchos colaboradores del IMP y de otras instituciones del mundo. Sus técnicas de cálculo llegaron a tal refinamiento que requirieron la colaboración de los mejores expertos en dicho campo, así como

el uso de las computadoras más potentes de las que se disponía en la época en que realizó sus investigaciones.

Al tocar, aunque sólo sea superficialmente, este aspecto de la obra de Novaro, no puedo olvidar la importancia que tuvo en la formación de muchos investigadores jóvenes tanto del país como del extranjero. La dirección de más de treinta tesis de maestría y doctorado y las decenas de estudiantes e investigadores extranjeros que han venido a México a trabajar con él, muestra tanto la influencia internacional de la obra de Novaro, como su interés en la formación de recursos humanos que son fundamentales para el progreso de nuestro país.

Aunque Novaro es un físico teórico, los resultados de sus investigaciones en el campo de la catálisis requerían una comprobación experimental y por ello muchos de los que se formaron bajo su dirección continuaron su labor en la experimentación.

Siguiendo su clara vocación de abrir nuevos temas de investigación y de formar jóvenes especialistas en campos aún no existentes, Novaro dio muestras de una gran versatilidad. Por un lado de la catálisis pasó a la fotocatalisis, más compleja porque conjuga efectos fotoquímicos con los catalíticos. Por otro lado se ha interesado en problemas de biofísica y entre sus estudiantes en este campo figuran algunos que dirigen laboratorios en la rama

mencionada, tanto en Cuernavaca como en Varsovia.

Novaro dio muestra de su responsabilidad, después del catastrófico temblor de 1985 al formar, junto con Jorge Flores, Thomas Seligman y varios brillantes estudiantes, un grupo para el estudio de los sismos partiendo de las bases físicas y matemáticas más rigurosas. Su éxito en este campo, como en tantos otros, se muestra por el hecho de que sus publicaciones se realizan en las revistas más prestigiadas, y donde el refereo es feroz.

Entre las aplicaciones prácticas de los estudios teóricos de Novaro, figuran algunos que han realizado sus colaboradores en relación con la contaminación ambiental, así como la obtención de varias patentes relacionadas con la preparación de catalizadores.

Entre los premios que Novaro ha recibido figura el de la Academia de la Investigación Científica (1971), el Nacional de Ciencias y Artes (1983) y el de Ciencias de la UNESCO (1993).

Sus trabajos de investigación son ya cerca de 170, así como son centenares sus conferencias y presentaciones en congresos tanto nacionales como extranjeros. Todo lo anterior lo ha realizado Novaro cumpliendo simultáneamente tareas administrativas, entre las que se destaca en los últimos años la de ser Director del Instituto de Física de la UNAM, en la que actualmente está en su segundo período.

Por todos los méritos que he mencionado, El Colegio Nacional se enorgullece este día al recibirlo entre sus miembros.

ÍNDICE

- Leopoldo Solís, *Palabras de salutación*.....9
- Octavio Novaro Peñalosa, *Hacia una teoría de la catálisis. Convergencia de conceptos de la física, la química y la biología*, discurso de ingreso a El Colegio Nacional.....13
- Marcos Moshinsky, *Contestación al discurso de ingreso del Dr. Octavio Novaro Peñalosa como miembro de El Colegio Nacional*.....41

Se terminó de imprimir en los Talleres de la Editorial Cromocolor, S. A. de C. V., Miravalle 703 Col. Portales, C. P. 03300, México, D. F., en marzo de 1996. La edición consta de 1 000 ejemplares.