

Investigación básica vs. investigación aplicada. Parte I

Andoni Garritz

Vamos a acompañarnos en este análisis de las opiniones de dos científicos latinoamericanos expertos en Química Teórica: Eduardo Alberto Castro, argentino, y Eduardo V. Ludeña, ecuatoriano que labora en Venezuela. Ambos son colegas como químicos teóricos del autor de esta editorial, conocidos por él desde los años setenta y a quienes ha planteado tres preguntas para guiarse en el tema bajo análisis:

1) ¿Qué piensas de la distinción que todavía se da entre ciencia básica y ciencia aplicada?

2) ¿Cuáles son tus aportaciones más importantes a las ciencias químicas?

3) ¿Cuáles de tus aportaciones científicas pueden tener una aplicación importante en el futuro? ¿Para qué pueden ser útiles?

La opinión de Eduardo Castro con relación a la primera pregunta es lacónica, pero contundente:

“La ciencia es una y estas divisiones son arbitrarias y alejadas de la realidad pues, en la actualidad, la investigación de un dado fenómeno demanda de la aportación experimental y la consecuente complementación teórica. Por otra parte, la ciencia experimental está fundada en alguna clase de perspectiva teórica, sea ésta explícita o implícita.”

Parece que Eduardo Castro ha comprendido ‘ciencia básica’ como ‘ciencia teórica’ y ‘ciencia aplicada’ como ‘ciencia experimental’. No podemos sino estar de acuerdo con lo que marca Castro, pues ya nos dice Mario Bunge (1972) que «la ciencia es teoría más experimentación planeada».

Por su parte, para responder a la misma primera pregunta, Ludeña hace una larga disertación que vale la pena leer completa. La partiremos en dos pedazos, empezando por el que se refiere a la ciencia en el primer mundo:

“Esta distinción se da sobre todo en países no desarrollados. Por eso, para responder a esta pregunta con propiedad creo que es indispensable poner primero en perspectiva ciertos

aspectos históricos y políticos de la ciencia.

”En el siglo XVIII, la ilustración (*i.e.*, enciclopedistas, etcétera) consideran a la ciencia como el instrumento idóneo para la tarea de explorar los secretos de la Naturaleza, de entender el Mundo y de encontrar la ubicación del Hombre en el Universo (todo con mayúsculas, ya que se trataba de la Gran Empresa).

”Para el siglo XIX, la ciencia además adquiere importancia práctica, que coincide y favorece el desarrollo de la burguesía emergente heredera de la revolución francesa en Europa y de la clase empresarial capitalista en Estados Unidos y Gran Bretaña (y de allí la importancia de Pasteur, o de Watt, o de Edison). La incorporación progresiva de la ciencia a la industria dio pie para que (los positivistas, por ejemplo) proyectaran una visión idílica de cómo las aportaciones de la Ciencia y la Tecnología iban a contribuir al bienestar humano y de cómo el Progreso (también con mayúscula) generado por ellas erradicaría la superstición y mitigaría las desigualdades sociales.

”Además, para comienzos del siglo XX la ciencia adquiere una importancia fundamental para desarrollos bélicos. Así, por ejemplo, el proceso Haber, en el cual se usa el nitrógeno del aire para la formación de amoníaco apareció en Alemania en la Primera Guerra Mundial, cuando este país ya no tuvo acceso a las rutas para la explotación de los nitratos. Por cierto, la optimización de este proceso, para tomar nada más que un ejemplo, requiere sin embargo de conocimientos básicos ya que están involucradas la destilación fraccionada del aire, la generación de hidrógeno a partir de CH_4 y agua, el diseño de catalizadores y de reactores, etcétera. Esto implica conocimientos tanto teóricos como prácticos de termodinámica, reacciones químicas, ciencias de los materiales, además de métodos matemáticos de simulación.

”No es de extrañarse entonces, que tanto en Europa como en los Estados Unidos se creara en el siglo XX una inmensa estructura, en cuyo



Eduardo A. Castro. Tomada de <http://www.fundacionkonex.com.ar/premios/curriculum.asp?ID=2490&ano=2003>

centro están las universidades, los institutos tecnológicos y las escuelas de ciencia aplicada y en cuya periferia están las industrias. En esa estructura hay un continuo entre la generación de conocimientos, su desarrollo tecnológico y su aplicación tanto en la industria civil como en la bélica. Y en esta estructura tanto la ciencia básica como la aplicada tienen igual importancia. De hecho, no son fenómenos separados y forman parte de un mismo proceso. Hay que anotar que sólo una pequeña parte del conocimiento básico encuentra aplicación tecnológica (menos del 10%) y también que una gran parte de los desarrollos tecnológicos (un 50%) se hace en las industrias.

”Pero a pesar de esta participación industrial, el costo de mantener esta estructura y financiar la investigación y sus aplicaciones tecnológicas ha estado a cargo, en forma mayoritaria, de los gobiernos, a través de los presupuestos dados a las universidades públicas, de los alicientes tributarios para las donaciones a universidades privadas, de los programas de ayuda a la investigación financiados directa o indirectamente por el Estado (NIH, Department of Defense en los EEUU, por ejemplo), etcétera. Sin embargo, los beneficios han ido casi en su totalidad hacia las empresas privadas.

”De esta manera ha habido una inversión pública, esto es, un gasto social que ha sido apropiado por una élite. Esta apropiación se realiza a través de un sistema de patentes y de propiedad intelectual (como un ejemplo reciente de la controversia sobre esta apropiación, podemos mencionar la demanda de Suráfrica a transnacionales farmacéuticas sobre la propiedad intelectual de medicinas contra el SIDA). Una de las consecuencias de esta apropiación está en que nunca en la historia del mundo ha habido tanta concentración de la riqueza en tan pocas manos como en la época actual.

”Menciono lo de la apropiación porque ésta introduce un elemento económico y político en la ciencia. Los científicos, esto es los que generan los conocimientos, se ven sujetos a un sistema de recompensas, no tanto económicas (nunca, ni los profesores de las universidades más famosas, ni de lejos llegan jamás a ganar tanto como los

gerentes de empresas) sino más bien sociales. Se crea una red invisible, un ‘pecking order’ que distribuye poder y honores y que a la vez responde a los intereses militares e industriales estratégicos de los grupos dirigentes proveyendo los avances tecnológicos necesarios para el afianzamiento de su poder político y militar (sería inconcebible, por ejemplo, la hegemonía de los Estados Unidos sin este soporte).

Resulta muy interesante la mención de que sea a principios del siglo XX, con el proceso Haber, cuando los militares se dan cuenta de la importancia fundamental de la ciencia para el avance bélico. Alemania, sin el posible acceso durante la Primera Guerra Mundial a las sales nitró de Chile, hubiera perdido un poder militar inimaginable, ya que, además de garantizar el abasto de fertilizantes nitrogenados a todo el mundo, el nitrato chileno era la materia prima para fabricar múltiples explosivos (trinitrotolueno – TNT –, nitroglicerina y nitrocelulosa). El proceso Haber de 1909 para obtener amoníaco a partir del nitrógeno del aire y el de Ostwald, en 1907, al obtener el catalizador que permite convertir en ácido nítrico el amoníaco, daban a Alemania una ruta alternativa para sus nitroreacciones bélicas, la que emplearon una vez que Inglaterra cerró la ruta hacia Chile en las Islas Malvinas durante la guerra (Garritz y Chamizo, 2003).

Así, la ciencia tuvo en este caso como papel el de arma de dos filos, como el bisturí, que puede emplearse para salvar una vida en una operación o para segarla, al empleársele como un vil cuchillo asesino. El proceso Haber bien pudo emplearse para dar aire a la producción bélica alemana, y quizás prolongar la duración de la Primera Guerra, pero posteriormente se le usó para producir los fertilizantes que, entre otras cuestiones, propiciaron la enorme explosión demográfica del siglo XX (en realidad, hoy ya no podemos decir que esto fue bueno o malo).

Lo que menciona Ludeña sobre la apropiación industrial y bélica de los destinos de la ciencia, sobre todo de la aplicada, es una verdad como una casa,



Eduardo V. Ludeña. Tomada de <http://www.conicit.gov.ve/premios/htm1994.htm>

aunque luego nos da una luz dentro de este oscuro panorama cuando menciona:

“Hay, sin embargo, algunas tentativas en los países desarrollados de generar conocimiento que no pueda ser apropiado. Menciono como un caso paradigmático aquel de Linux, un sistema operativo informático, que se rige por las ‘copyleft’ en contraposición al ‘copyright’ usual de los productos del conocimiento. Además hay movimientos internacionales de científicos que hacen énfasis en el aspecto de la responsabilidad social de la ciencia, así como del poder que debe tener la sociedad, a través de instituciones democráticas, para determinar la utilización y controlar las prioridades de la ciencia (un ejemplo de esto es la Conferencia de Budapest, así como los Foros Sociales Internacionales).”

Vayamos ahora a la segunda parte de su respuesta, que tiene que ver con nuestras economías del tercer mundo y el papel que puede tener la ciencia en ellas:

“Ahora bien todo lo que he mencionado arriba sobre la ciencia básica y aplicada en el mundo desarrollado, incluyendo el afianzamiento de una élite industrial-militar, tiene mucho que ver con lo que pasa en los países no desarrollados.

”En primer lugar, las industrias que se han implantado en el tercer mundo o son maquiladoras o industrias ‘llave en mano’, o cuando más son industrias que generan *in situ* sólo una parte pequeña de los insumos tecnológicos. No hay industria de alta tecnología. En segundo lugar, el financiamiento del sector universitario siempre ha sido deficiente y la inversión en ciencia y tecnología siempre ha estado muy por debajo del 2% del PIB. En tercer lugar, los convenios internacionales de comercio, al requerir la apertura de mercados, definen la división del trabajo y en forma indirecta entorpecen el desarrollo tecnológico independiente. En cuarto lugar, el sistema de patentes y de propiedad intelectual (que es impuesto en los convenios del FMI o del BID) crea una gran desventaja en cuanto a nuestra posibilidad de generar tecnología propia. En quinto lugar, las mejores condiciones de trabajo que para el personal científico se ofrecen en los países desarrollados ha inducido una ‘fuga de cerebros’.

”En nuestros países subdesarrollados la pregunta de si debemos hacer ciencia pura o ciencia aplicada proviene sobre todo de políticos que (en forma cándida o retórica) creen que podría darse crecimiento económico si los científicos de estos países en lugar de hacer ciencia básica se dedicaran a resolver problemas de interés tecnológico nacional. Esto no es cierto porque como hemos señalado más arriba, nuestro atraso se debe principalmente a causas políticas y económicas. No hay una conexión directa entre descubrimientos en el tercer mundo y progreso tecnológico. Hay casos en que se han fabricado catalizadores mejores que los importados pero que por razones ajenas a lo científico no se incorporan a los procesos industriales.

”Tendría que generarse en un país en desarrollo una clase empresarial capitalista que esté dispuesta a abrirse un nicho dentro del capitalismo global para que, entonces sí, los descubrimientos básicos y las innovaciones tecnológicas generadas dentro del país puedan convertirse en motores de desarrollo. El surgimiento de tal clase lo veo muy difícil. Lo que sí podría darse es que ocurra una absorción de estas innovaciones por parte de empresas que sean o ya directamente estatales o que estén parcialmente financiadas por el Estado. Esto, claramente requiere que se rompa el dogma neoliberal.

”Un caso límite, es por ejemplo el de Cuba en donde debido a las decisiones políticas y a su aislamiento se ha podido dar un gran crecimiento de la biotecnología, que ha generado un desarrollo autónomo de procesos y patentes.

”Dentro de esta perspectiva, el papel de los científicos en los países subdesarrollados, llega a delinarse con mayor claridad. Un beneficio social inmediato que emana de la existencia de un cuerpo de científicos debidamente entrenados es la capacidad que dan al país de por lo menos hablar el idioma de la ciencia y de poder negociar con algún criterio la compra de tecnología. Abdul Salam, cuenta que en Egipto, llegó a venderse una fábrica de diodos para radios cuando ya se había inventado el transistor que los reemplazaba. Otro beneficio es la capacidad de poder impartir conocimientos actualizados en las universidades y escuelas técnicas. Sin

embargo, resulta inevitable que una buena parte del esfuerzo de estos científicos esté dirigido a adaptarse y encontrar algún lugar dentro del 'pecking order' internacional. Inclusive, a adoptar 'problemas de moda', muchos de los cuales tienen alguna conexión con necesidades bélicas o industriales de los países desarrollados.

Nuevamente, hasta aquí el panorama es oscuro, pero Eduardo Ludeña cierra con la posible «canalización» de los males hacia algo bueno con una ciencia de excelencia local, que desarrolle ««iniciativas para encarar problemas locales y para presentar soluciones que puedan ser transformadas en tecnología por empresas estatales»:

”En mi opinión, este inevitable acoplamiento a la ciencia dominante, ya que no puede ser revertido, al menos tiene que ser canalizado. Es necesario fomentar la ciencia de excelencia, estimular a los científicos a que formen grupos y financiarlos debidamente. Por ciencia de excelencia quiero decir aquella que se ocupa de problemas difíciles, que abre nuevas perspectivas y derroteros. Lo contrario a la ciencia de excelencia es aquella que se convierte en apéndice de las investigaciones de los grandes grupos internacionales y que esencialmente se encarga de rellenar los pequeños huecos que deja ésta, o que proporciona la mano de obra para la realización de proyectos de empresas transnacionales. Un ejemplo de lo último sería el realizar estudios de productos naturales para beneficio de compañías transnacionales farmacéuticas que se encargarían de su transformación y comercialización.

“Estoy convencido de que si en un país se dan grupos de excelencia que hacen ciencia de primera, las posibilidades de que surjan de ellos iniciativas para encarar problemas locales y para presentar soluciones que puedan ser transformadas en tecnología por empresas estatales, son mucho más altas.”

Con relación a las preguntas dos y tres del cuestionario, he aquí las respuestas de Eduardo Castro

2. Estudios teóricos en el ámbito de la teoría QSAR/QSPR¹ para predecir y correlacionar diversas propiedades fisicoquímicas y actividades biológicas en distintas clases de compuestos químicos.

3. Las relaciones derivadas de lo señalado en 2-son de aplicación inmediata porque la forma de hacerlo es sencilla y directa.

Hay que resaltar nuevamente lo corto de sus respuestas, lo cual no revela nada con respecto a la calidad de su trabajo como científico, ya que Eduardo A. Castro es Profesor Titular de la Universidad Nacional de La Plata, Argentina, Investigador Superior del CONICET, Presidente de la Asociación Química Argentina y Vicepresidente de la Sociedad Científica Argentina. Es autor de 650 publicaciones primarias en los campos de la fisicoquímica, química teórica, educación, alfabetización científica, divulgación científica y administración y organización científico-tecnológica.

Entre sus obras más citadas se encuentran los libros de Castro, Fernández y Arteca (1990) y de Castro y Fernández (1995). Un ejemplo de su trabajo más reciente son los artículos de Castro (1997), R - manelli, Cafferata y Castro (2000) y Duchowicz, Castro y Toporov (2002). Sus innumerables artículos científicos en revistas de alto impacto lo llevaron al registro de los químicos más citados en el mundo en el período 1987-1997.

Eduardo Castro es, adicionalmente, el fundador de las Escuelas Latinoamericanas de Química Teórica y ha recibido un gran número de premios y reconocimientos nacionales e internacionales.

Por su parte, Eduardo Ludeña respondió de la siguiente forma a las preguntas dos y tres:

2. Mis contribuciones más importantes están en el campo de la formulación rigurosa de la teoría del funcional de la densidad (TFD). La TFD ha abierto una nueva visión en cuanto a la aplicación de la mecánica cuántica a la química y a la física de materia condensada. Su importancia ha sido reconocida cuando se otorgó en 1998 el

¹ Las siglas QSAR/QSPR se refieren a Quantitative structure-activity relationship y Quantitative structure-property relationship, técnicas integradas al análisis del ciclo de diseño racional de medicamentos, que asumen que la actividad biológica está correlacionada con las propiedades o la estructura químicas y que, como consecuencia, la actividad puede ser modelada como una función de atributos fisicoquímicos calculables. Tal modelo de predicción de actividad puede utilizarse para seleccionar compuestos como candidatos de actividad biológica específica o sugerir direcciones hacia nuevas moléculas a probar.

premio Nobel de Química a W. Kohn por su participación fundamental en la formulación de la TFD.

Sin embargo, en vista de que en la versión de Kohn hay una serie de problemas matemáticos de base, he participado con E.S. Kryachko (un físico matemático ucraniano) en la elaboración de una versión alternativa, llamada versión de escalamiento local de la TFD (TFD-EL) [Kryachko y Ludeña, 1990; Ludeña y López Boada, 1996; Ludeña *et al*, 1999] en que se solucionan estas dificultades. Entre los logros de la TFD-EL podemos mencionar la generación de funcionales de la energía cinética más de un orden de magnitud más precisos que aquellos de la TFD usual [Karasiev *et al*, 2000], y, por primera vez, la generación de un funcional exacto para un sistema modelo [Ludeña *et al*, 2004]. Este último resultado, sin embargo, pone en tela de juicio la universalidad de los funcionales de la TFD usual.

3. La utilización de los funcionales de energía cinética de la TFD-EL para la construcción de programas de dinámica molecular que sólo dependan en la densidad ("orbital-free") puede llegar a tener un importante impacto en la química teórica.

La razón es que estos funcionales además de tratar en forma rigurosa los efectos físicos que contribuyen a la energía cinética, también podrían contribuir a acelerar notablemente los cálculos. Esto permitiría quizás romper el cuello de botella con respecto al tamaño de los sistemas que actualmente pueden modelarse con precisión.

No debemos omitir algunos elementos que nos hablen de la calidad del trabajo científico de Eduardo Ludeña, quien es el jefe del Laboratorio de Físico-Química Teórica del Instituto Venezolano de la Investigación Científica, desde 1978, y acaba de ser electo Investigador Emérito del IVIC.

Realizó sus estudios de B.S. en Química, Universidad de Ohio en Athens, EEUU (1962); de Ph. D. en Físico-Química, en el Case Institute of Technology, Cleveland, Ohio, EEUU (1966); y el postdoctorado en el Centro de Mecánica Ondulatoria Aplicada, París, Francia (1966-67).

Ha sido profesor visitante de:

- El Departamento de Química, Universidad de Mc-Master, Hamilton, Ontario, Canadá (1978-79),
- La Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México (1979),
- El Instituto de Física Teórica, Kiev, URSS (1987),
- El Departamento de Química, Universidad de Valencia, España (1988), y

- El Departamento de Química Aplicada, Instituto Tecnológico de Muroran, Hokkaido, Japón (1991).

Ludeña es Premio Nacional de Ciencia del CONICIT (1994); miembro, por elección, de la Academia de Ciencias de América Latina (1994); investigador II del Programa de Promoción del Investigador (1989). Cuenta con más de cien artículos y capítulos de libros publicados en los campos de química cuántica, teoría del funcional de la densidad y física atómica y molecular

Como podemos ver, nos han apoyado a realizar esta editorial sobre ciencia básica y ciencia aplicada cinco científicos de primera calidad en Latinoamérica, pues vale la pena recordar también a nuestros primeros tres invitados con los que hicimos la editorial del número anterior, Martín Hernández Luna, Eusebio Juaristi y Jaime Keller. ■

Referencias

- Bunge, M. *Teoría y realidad*, Editorial Ariel, Barcelona, 1972.
- Castro, E. A. and F. M. Fernandez (editors) *Algebraic Methods in Quantum Chemistry & Physics*, CRC Press Inc., ISBN 0-849-38292-0, 1995.
- Castro, E. A., F. M. Fernandez, and G. A. Arteca (editors), *Large Order Perturbation Theory & Summation Methods in Quantum Mechanics. Paperback* Springer-Verlag, ISBN 0-387-52847-4, 1990.
- Castro, E. A., *Comp. & Chem*, 21(5), 305, 1997.
- Duchowicz, P.; E. A. Castro; A. A. Toropov. Improved QSPR Analysis of Standard Entropy of Acyclic and Aromatic Compounds using Optimized Correlation Weights of Linear Graph Invariants. *Computers & Chemistry* 26(4): 327-332, 2002.
- Garriz, A. y Chamizo, J.A., *Del tequesquite al ADN. Algunas facetas de la química en México*. Colección "La ciencia para todos", número 72. Fondo de Cultura Económica, México, cuarta edición 2003.
- Karasiev, V.V., E.V. Ludeña y A. Artemyev, *Phys. Rev. A* 62, 062510, 2000.
- Kryachko, E.S. y E.V. Ludeña, *Energy Density Functional Theory of Many-Electron Systems*, Kluwer, Dordrecht, 1990.
- Ludeña, E.V. and R. López Boada, *Topics Curr. Chem.* 180, 169, 1996.
- Ludeña, E.V., V. Karasiev, R. López Boada, E. Valderrama y J. Maldonado, *J. Comput. Chem.* 20, 155, 1999.
- Ludeña, E.V., D. Gómez, V. Karasiev and P. Nieto, *Inter. J. Quantum Chem.* 99, 297, 2004.
- Romanelli, G. P., L. F. R. Cafferata and E. A. Castro, *J. Mol. Struct. THEOCHEM* 504, 261, 2000.