

¡Hasta siempre, querida Sagrario!



Si hay empeño, se continúa hacia arriba lo que otros empezaron... Así comenzaba el prólogo que se escribió en 1994 para una pequeña recopilación histórica de lo que hasta entonces había sido la Cristalografía “española”, y especialmente aquella que se había desarrollado entre las paredes del entrañable Rockefeller (hoy día Instituto de Química-Física “Rocasolano”, CSIC). Esas primeras palabras de aquella introducción fueron escritas por la heroína de este recordatorio, la Prof. Sagrario Martínez Carrera, quién nos dejó, tras 86 años de intensa vida, el pasado 18 de diciembre de 2011. Y lo hizo tan silenciosa y reservadamente como callada y ejemplar fue su vida científica, e incluso su vida privada tras la jubilación.

No resulta nada fácil escribir sobre la personalidad de Sagrario Martínez Carrera (tía Sarito para sus queridos sobrinos y hermanos), ya que el relator no sabría separar entre la grandeza y valentía científica de Sagrario y el afecto que sembró entre sus compañeros de trabajo, y especialmente entre todos aquellos que aprendimos directamente de ella, haciendo florecer sus deseos expuestos al principio del mencionado prólogo. Inquieta, siempre joven de carácter, valiente hasta límites insospechados, llamativamente inteligente, inconformista, pero prudente, la Prof. Sagrario Martínez Carrera fue una de las científicas que, sin duda, puede considerarse como uno de los exponentes extraordinarios de la ciencia española de mediados del siglo XX y heredera, en segunda generación, de aquella primigenia Sección de Rayos X que, en 1948, formó Julio Palacios en el Instituto Alonso de Santa Cruz y que reunió a todos, y a todo lo que le quedaba de la antigua Junta de Ampliación de Estudios.

Sagrario Martínez Carrera ingresó en el Rockefeller coincidiendo con el principio de la década de 1950, fechas en las que personalmente ya estuvo directamente implicada en un nuevo planteamiento estratégico y algunas acciones que pueden considerarse como preludio de la automatización cristalográfica. Así, para acortar el tiempo dedicado a los millares de operaciones numéricas, necesarias para la determinación de la estructura atómica de los cristales, abordó el ingente trabajo de preparación de las denominadas “tiras de Beevers-Lipson”. Estas tiras de papel contenían valores predeterminados de algunas funciones trigonométricas que se usaban, como aproximación, para calcular a mano transformadas de Fourier, operaciones matemáticas que relacionan los espectros de difracción de los cristales con las funciones de Patterson o de densidad electrónica en los mismos.

En esos mismos años, la intrépida Sagrario (con “mamá auestas”, tal como ella misma relataba con todo el cariño y respeto hacia su madre) se desplazó a la Universidad de Ámsterdam con miras a lo que, a partir de entonces, sería la meta de su vida, la incorporación de nuevas tecnologías cristalográficas al CSIC y al resto de la comunidad científica española. Su estancia de varios años en Holanda fue crucial para su formación científica, pero sobre todo para el futuro inmediato del grupo del Rockefeller. Allí utilizó, por primera vez, experimentos de difracción a baja temperatura y cálculos tridimensionales de densidad electrónica. Y pudo, además, entrenarse en el manejo y diseño de los más que incipientes programas de cálculo aplicados a los ordenadores IBM 405, 421 y 624. Gracias al tesón de Sagrario Martínez Carrera, a un “endemoniado” panel electrónico y a unos juegos de fichas perforadas, regalo de la Prof. MacGillavry, pudo comenzar en Madrid la metodología moderna del cálculo con ordenador y realizar los primeros estudios tridimensionales.



Y muy pronto volvió a ser la infatigable Sagrario Martínez Carrera, quien en 1962, hizo de nuevo las maletas, esta vez con destino a la Universidad de Pittsburg en Estados Unidos, para trabajar con el Prof. Jeffrey y mejorar así su aprendizaje del incipiente “cálculo electrónico”. Allí coincidió con uno de sus inolvidables amigos, Paul Beurskens, hoy en día Profesor felizmente retirado de la Universidad de Nijmegen (Holanda), quien con toda seguridad la echará también mucho de menos. Recién regresada a Madrid de su estancia en Estados Unidos, y con un amplio bagaje en programación en Autocode y Fortran, puso a punto una serie de programas de cálculo, imprescindibles para abordar la resolución de la estructura de los cristales. Con ello, la estrepitosa máquina IBM 7070, que acababa de adquirir el CSIC, se vio inesperadamente sobrealimentada por el trabajo que llegaba de las manos de Sagrario y que se acumulaba en gavetas y pilares de fichas, lo que supuso un alivio indudable para las expectativas científicas del grupo de cristalógrafos del Rockefeller, entre otros. En 1966 regresó de nuevo a Holanda, y desde la Universidad de Ámsterdam, como autora única, publicó lo que sería su artículo más querido, el que recibió casi 150 citas, la estructura tridimensional a baja temperatura de una molécula orgánica, el imidazol (*The crystal structure of imidazole at -150°C*).

Sagrario siempre tuvo una palabra amable y positiva para el que la necesitaba, y no sólo para hablar de investigación. Formó parte de la generación de mujeres extraordinarias de nuestra ciencia, del CSIC, y ¿por qué no decirlo?, de la ciencia universal, que tuvieron que pasar por momentos amargos, y que hubieron de ganar a pulso, sin estridencias, su valía, para no ser ignoradas en el marco de la dominancia del género masculino, típico de algunos de aquellos años. En el marco de su humildad, Sagrario nunca dio a conocer sus contribuciones a (y protagonismo en) varios libros publicados allende nuestras fronteras, tales como *Women of Science, Righting the Record*, editado por G. Kass Simon y Patricia Farnes, y *Notable Women Scientists*, editado por Pamela Proffitt. Pasaron los 70, los 80 y por fin la década de 1990, fecha en la que desapareció como los ojos del Guadiana, de un modo que sólo unos pocos han sabido hacer con esa elegancia que la caracterizó hasta al final de su vida, dejando un sinfín de trabajo bien hecho y silencioso, de buen hacer y de cariño hacia todos aquellos que pasaron por su lado, entre los que se cuenta el autor de estas palabras, y el que, arrojándose la representación de muchos, levanta una copa simbólica y le dedica, con todo el cariño y respeto, un *¡hasta siempre, querida Sagrario!*

Martín Martínez-Ripoll, en nombre de todos sus compañeros y amigos
Departamento de Cristalografía y Biología Estructural
Instituto de Química-Física “Rocasolano”, CSIC; Madrid enero de 2012

Sagrario Martínez-Carrera, in Memoriam



Sagrario Martínez Carrera nació en Madrid el 10 de mayo de 1925, como hija más pequeña de una familia de cuatro hermanos. Química, cristalógrafa y excelente persona, se licenció en 1948 en la Universidad Complutense de Madrid, obteniendo el título de Doctor en 1955. Durante su vida científica desempeñó los puestos de Colaborador Científico, Investigador Científico y Profesor de Investigación del CSIC, siempre asociada al Departamento de Cristalografía del Instituto de Química Física “Rocasolano”, exceptuando sus estancias pre- y posdoctorales en Holanda y Estados Unidos.

Como investigadora infatigable, estuvo implicada de lleno en todo lo que pasó por su vida científica, formando parte activa de lo que hoy se denomina Grupo Español de Cristalografía y Crecimiento Cristalino, del Comité Español de Cristalografía, del Comité Científico Asesor del CSIC, y se involucró en tareas de la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr).

En 1956 organizó en Madrid la primera reunión inter-congresos de la IUCr, y desde entonces estas reuniones especializadas, celebradas entre congresos y asambleas de la Unión, se convirtieron en una característica regular de las actividades de esta organización internacional. Del mismo modo, en abril de 1974 organizó, de nuevo en Madrid, otra conferencia inter-congreso sobre el tema de dispersión anómala, cuyos resultados se integraron en un valioso libro que se ocupó de todos los aspectos importantes de la dispersión anómala conocidos hasta ese momento y en donde acudieron personajes tan importantes como Dorothy Hodgkin (laureada Nobel de Química en 1964), Johannes M. Bijvoet, uno de los padres de la interpretación del fenómeno, Ralph W.G. Wyckoff, Paul P. Ewald, Rudolf L. Mössbauer, Lyle H. Jensen, S.C. Abrahams, y un largo etc. de científicos que pasaron, por la puerta grande, a la historia mundial de la cristalografía. Por último, en 1987 y como producto de su preocupación sobre la subestimación de la precisión de las constantes reticulares en los cristales, recibió el encargo de la Comisión de Aparatos de la IUCr, de organizar y coordinar el proyecto denominado *Accuracy in Lattice Parameter Measurement*.

Durante todos aquellos años difíciles, y hasta 1990, fecha de su jubilación, Sagrario dirigió decenas de Tesis Doctorales, y aunque por su humildad no figurara directamente como tal, formó y enseñó a otros muchos. Publicó más de un centenar de artículos en revistas internacionales que recibieron muy por encima del millar de citas, cosechando lo que hoy denominamos un “índice h” próximo a 20 y un número promedio de citas superior a 15 veces por artículo, números que hoy parecen fáciles de alcanzar, pero que en absoluto lo fueron para nuestra heroína. Pasará a la historia como persona e investigadora extraordinaria y, especialmente, como la introductora en España de la programación informática en cristalografía.

Sagrario falleció el 18 de diciembre de 2011. Descanse en paz.

Martín Martínez-Ripoll, en nombre de todos sus compañeros y amigos
Departamento de Cristalografía y Biología Estructural
Instituto de Química-Física “Rocasolano”, CSIC; Madrid enero de 2012

Sagrario Martínez-Carrera, in Memoriam



Prof. Sagrario Martínez-Carrera was born in Madrid on May 10th 1925, as the youngest daughter of a family of four siblings. Chemist, excellent crystallographer and better person, she got her BS in 1948 at the Universidad Complutense de Madrid, earning her PhD title in 1955. She held the positions of Associate Scientist, Investigator Scientist and Research Professor at the CSIC (Spanish National Research Council), always associated with the Department of Crystallography of the Institute of Physical-Chemistry "Rocasolano", excluding the periods of her pre- and post-doctoral stays in the Netherlands and in the USA.

Moreover, as a tireless researcher, she was always fully involved in all events that took place during her scientific life. She was active in the Spanish Group of Crystallography and Crystal Growth, in the Spanish Committee of Crystallography, in the Scientific Advisory Committee of the CSIC, and implied in some tasks of the International Union of Crystallography (IUCr). At the IUCr Executive Committee meeting arranged during the Third General Assembly in Paris in July 1954, it was proposed that the IUCr should organize specialized symposia between the assemblies. Immediately Prof. Martínez-Carrera became a very active co-organizer of the first of these meetings, that was held in Madrid in 1956 and since then, the specialized Inter-Congress meetings became a regular feature of the Union's activities.

Another international conference on the subject of Anomalous Scattering was also co-organized by Prof. Martínez-Carrera in April 1974, again in Madrid, the results of which were assembled into a valuable book dealing with every conceivable aspect of anomalous scattering known at that time. Very well-known crystallographers took part in the event, as Dorothy Hodgkin (Nobel laureate in Chemistry in 1964), Johannes M. Bijvoet, Ralph WG Wyckoff, Paul P. Ewald, Rudolf L. Mössbauer, Lyle H. Jensen and S.C. Abrahams, among others. Finally, in 1987, and as a result of an expression of concern by the Commission on Journals of the IUCr, with respect to the underestimation of standard deviations in the lattice constants reported in papers submitted to the journals of the IUCr, Sagrario Martínez-Carrera was appointed by the Commission on Crystallographic Apparatus of the Union, to organize and coordinate the project called *Accuracy in Lattice Parameter Measurement*.

During those difficult years, and until 1990, date of her retirement, Prof. Martínez-Carrera led dozens of doctoral theses, and although not directly as director (due to her humility), she trained many other young scientists and university professors. She published over a hundred of articles in international journals that received thousands of citations, obtaining what we now call an "h index" near to 20 and an average number of citations per article over 15, numbers that nowadays seem very easy to reach, but not during the years of our protagonist. We will always remember Sagrario Martínez-Carrera as an extraordinary person and researcher, and especially in Spain she should be considered as the introducer of the early crystallographic computing.

Sagrario Martínez-Carrera passed away on December 18th, 2011 and we are truly grateful for the privilege of having known her.

Martín Martínez-Ripoll, on behalf of all colleagues and friends
Department of Crystallography and Structural Biology
Institute of Physical-Chemistry "Rocasolano", CSIC; Madrid, January 2012