

Investidura com a doctor honoris causa
del Dr. Jean-Paul Malrieu



Investidura com a doctor honoris causa
del Dr. Jean-Paul Malrieu

Sessió acadèmica extraordinària,
29 de gener de 2013



Universitat Rovira i Virgili
Tarragona

Malrieu

Discurs d'investidura: © 2013 by Jean-Paul Nalrieu

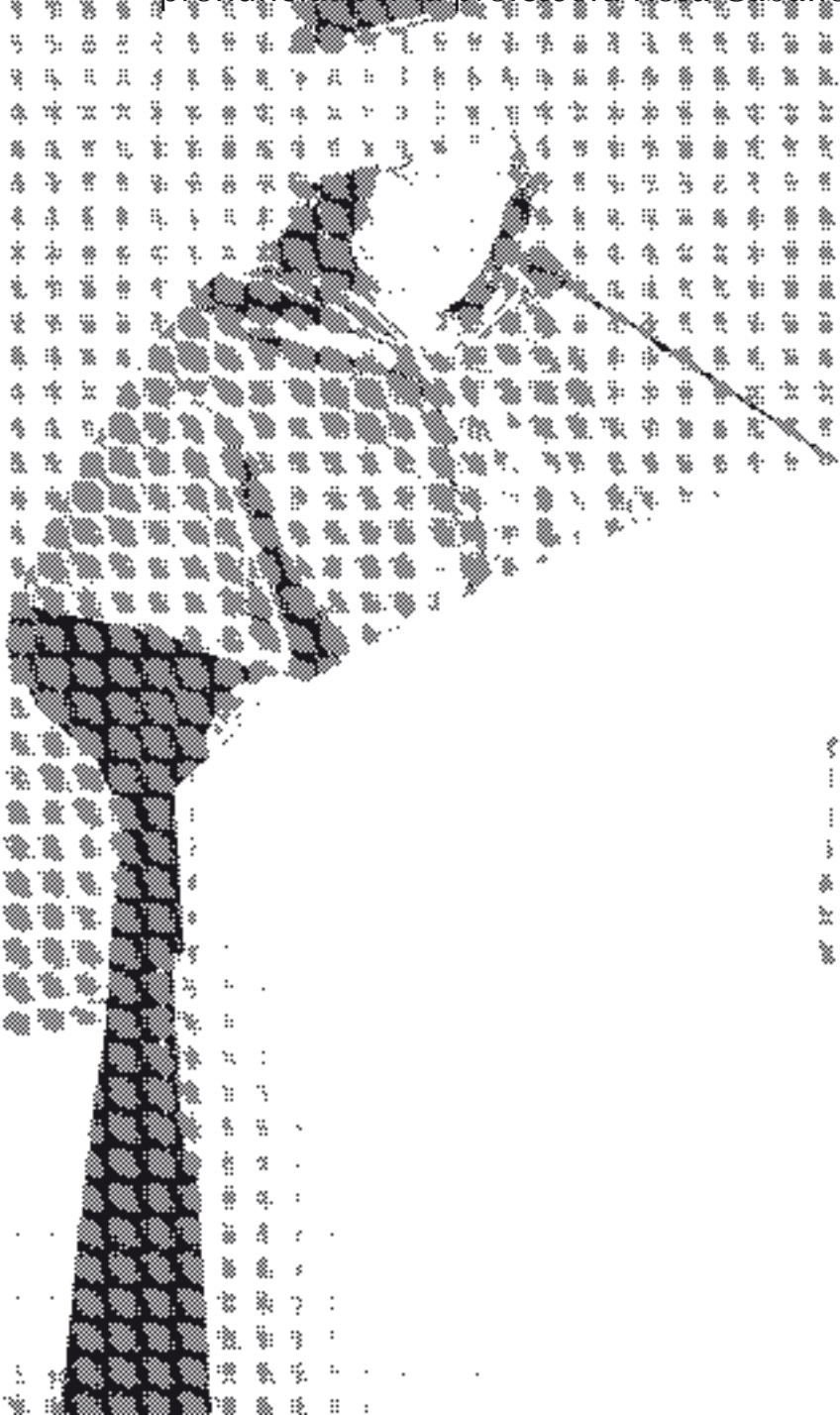
Fotografia: Ramon Torrents

Imprès per Indústries Gràfiques Gabriel Gibert, SA

~~Dipòsit Legal: T.1328.2012~~



Elogi del candidat pronunciat per la professora Rosa Caballo



Rector Magnífic,
Benvolgut professor Jean-Paul Malrieu,
Il·lustres autoritats acadèmiques,
Amigues i amics de la comunitat universitària,
Companyes i companys vinguts d'altres indrets expressament per aquest acte,

Senyores, senyors,

Els actes com el d'avui són transcendentals per a la Universitat Rovira i Virgili, no perquè són dels més solemnes sinó perquè s'hi valora i reconeix l'excel·lència de membres distingits de la comunitat científica internacional i els incorporem a la institució en qualitat de doctors honoris causa. Aquestes incorporacions honoren la nostra Universitat.

No m'és fàcil expressar l'emoció que sento en presentar davant de tots vostès el professor Jean-Paul Malrieu, un dels químics quàntics més rellevants de la seva generació, científic extraordinari i apassionat, d'una curiositat sense límits en el camp intel·lectual, la cultura, l'art o la natura, que ha sabut comunicar l'entusiasme als qui han tingut el privilegi de col·laborar amb ell, entre els quals tinc la sort de comptar-me.

El professor Jean-Paul Malrieu es va formar a l'École Normale Supérieure de Paris, centre de singular prestigi en la formació de les elits investigadores franceses, va fer la tesi a l'Institut de Biologie Physico-chimique, sota la direcció del prof. Bernard Pullman, i va ingressar al Centre National de la Recherche Scientifique. El final d'aquella dècada, la dels seixanta, eren anys de febril activitat al barri llatí de París, on es va concentrar un grupet de joves investigadors de les institucions veïnes, plens de talent i d'inquietuds envers una ciència encara nova, a cavall entre la física i la química: la química quàntica. Després de les enconades discussions filosòfiques que havien caracteritzat els primers temps de la teoria quàntica, s'havien començat a tractar problemes químics, limitats encara a molècules senzilles amb elements del segon període de la taula periòdica. En aquell entorn estimulants hi bullien les idees i el debat, i no pas únicament el de temàtica científica.

Ben aviat es va fer patent l'interès del jove Jean-Paul Malrieu per comprendre i avaluar la informació que proporcionen els càlculs quàntics, la funció d'ona ψ , en particular, la correlació electrònica, per interpretar els fenòmens químics i disposar d'una eina rigorosa d'anàlisi, de càlcul i de predicció. A finals dels seixanta va publicar treballs pioners de la metodologia quimicoquàntica que van tenir molta aplicació en les dècades posteriors. En aquella època de les beceroles de la informàtica, en què la informació es proporcionava als ordinadors a través de cinta de paper o, ja com un evident signe de progrés, en fitxes perforades, trobem la seva publicació més citada, referenciada més de 800 vegades, que proposava un mètode de càlcul, el CIPSI, i l'il·lustrava amb alguns exemples. Aquell treball mostrava que, incloent en els càlculs les contribucions físiques més significatives de forma rigorosa, a través d'una selecció racional, era possible compaginar l'exactitud dels resultats i fer el càlcul assequible. Un programa de càlcul, embrió del que més tard va utilitzar una multitud de químics teòrics europeus, donava accés a les aplicacions. Aquest mètode que de forma flexible permetia combinar dos nivells de tractament numèric amb diferent cost computacional, segons la jerarquia de les contribucions, va obrir les portes a l'estudi de sistemes amb metalls d'estructura electrònica complexa i dels estats excitats i l'espectroscòpia de sistemes d'interès en química o en física molecular. No cal dir que aquests principis segueixen sent perfectament vàlids avui dia, en què, tot i l'astronòmica multiplicació de la capacitat de càlcul dels ordinadors, els sistemes que ens interessa estudiar i entendre són més i més complicats.

L'any 1974, el professor Malrieu es va traslladar a Toulouse, a la seva regió d'origen, al Laboratoire de Physique Quantique, un laboratori jove de la Universitat Paul Sabatier. La trajectòria científica del Dr. Malrieu ha transcorregut des de llavors en aquest laboratori. Director d'investigació de classe excepcional, emèrit a partir del 2004, avui hi manté la mateixa activitat intensa de sempre.

En aquell moment, el professor Philippe Durand dirigia el Laboratoire de Physique Quantique. Les sinergies entre aquells dos potents motors intel·lectuals, envoltats dels membres que s'hi van anar afegint, van impulsar una etapa llarga i extremadament fèrtil d'aquell grup. S'hi va proposar metodologia rigorosa i s'hi van desenvolupar programes de càlcul que incorporaven els avenços. Aquests programes, per a l'alegria dels investigadors visitants d'altres grups que en general disposaven de recursos ben minvats, es difoni-

en desinteressadament, tradició, per cert, que el laboratori ha mantingut rigorosament — això ja diu alguna cosa del tarannà d'aquest grup. Per ajudar a difondre mètodes i tècniques de càlcul i facilitar el seu aprenentatge, s'hi van organitzar diversitat de tallers, que encara són presents en la memòria dels qui hi van participar, sobre pseudopotencials, sobre la utilització del mètode CIPSI, tallers particularment nodrits de joves italians i encara més d'espanyols que iniciaven el seu camí en el camp de la química teòrica en la dècada dels vuitanta. Uns quants assistents a aquest acte podran corroborar com van arribar a ser de decisives per al seu futur científic aquelles estades a Toulouse, sense cap mena de dubte pel que hi van aprendre, però també per la quantitat de col·laboracions i de lligams personals que hi van establir.

Els assoliments científics en el camp de la química teòrica són rarament objecte de titulars de diaris. Si de cas, són els ordinadors en què fem els càlculs els que constitueixen la notícia. Els avenços consisteixen a anar aprofundint pas a pas en el coneixement i la comprensió dels mecanismes que regeixen el comportament de les construccions moleculars a l'escala dels electrons i dels nuclis, per poder construir eines d'interpretació i de predicció fiables. És, doncs, un treball més aviat silenciós, que en cas d'èxit només té ressò en la comunitat de químics teòrics. Parteix de la mecànica quàntica i altres bases de la física, especula i utilitza desenvolupaments matemàtics, i descansa per aplicar-lo en la fantàstica capacitat informàtica actual. Aquest treball poc visible ha permès, no obstant això, construir les poderoses eines actuals de la química computacional que s'han guanyat un lloc en la investigació química i dels materials, com un instrument més, econòmic i net. Comunicar en termes comprensibles la importància de les aportacions més notables en aquest camp, que empra el llenguatge de la física i de les matemàtiques, no és una tasca fàcil: la terminologia és molt especialitzada i, per tant, en certa manera excloent. Els demano, doncs, disculpes si troben hermètica la meua explicació de les contribucions més rellevants del professor Jean-Paul Malrieu que esmentaré a continuació. Tanmateix, les seves aportacions han ajudat de forma tan notable al progrés del coneixement en aquest àmbit que no puc deixar de fer-hi referència en aquest acte. Confio, almenys, que sabré transmetre'ls que han estat molt importants.

La gran preocupació del professor Malrieu ha estat sempre comprendre la física subjacent en els sistemes químics per poder estudiar-ne les propietats de forma racional, amb la convicció que els reptes de la química teòrica

inexorablement se sustenten en tres punts: el rigor formal, la predicció numèrica eficient i la capacitat d'interpretació qualitativa. Ho podríem resumir amb aquest lema: "la interpretació, abans que el valor numèric; però el valor numèric, també. I si el valor numèric no quadra, busquem per què".

Les contribucions del professor Malrieu han estat molt variades i ha participat en les controvèrsies metodològiques de la química quàntica candents en cada moment. Després del mètode CIPSI abans esmentat i del programa de càlcul que amb l'ajuda d'alguns col·laboradors va esdevenir veritablement eficient i va ser profusament utilitzat durant un parell de dècades, li devem l'aportació de l'anàlisi detallada i comprensible de la correlació electrònica. En la dècada dels vuitanta, en plena eclosió del camp del magnetisme molecular i en un diàleg molt fructífer amb el mestre europeu d'aquest camp, el professor Olivier Kahn, va analitzar detalladament els factors electrònics que contribueixen a l'acoblament magnètic, de manera que aquesta propietat, difícil d'avaluar per la seva petitesa, es va poder estimar de forma adequada i, amb els desenvolupaments posteriors, amb gran precisió. A la mateixa època es remunten els procediments operatius que va proposar per condensar en un nombre limitat d'interaccions efectives la ingent informació que proporcionen els càlculs, desenvolupant noves tècniques de Hamiltonians efectius. Als noranta va aportar solucions originals i eficients per corregir la N-dependència, un problema rellevant per a la precisió dels càlculs quàntics d'alt nivell, objecte de molta literatura en el camp. Va participar també en la discussió sobre les alternatives de càlcul més potents del moment, els mètodes d'Interacció de Configuracions i els de *Coupled Cluster*, i va establir ponts entre totes dues.

No creguin que he estat exhaustiva, m'he limitat a comentar allò que conec millor de la seva producció d'idees. Tots aquests treballs han rebut centenars de cites. La seva productivitat ha estat molt rellevant, més de 350 articles en publicacions d'alt nivell, capítols de llibre i coedició de llibres; paral·lelament, les seves reflexions, propostes i mètodes s'han difós a través de les conferències i congressos als quals ha estat convidat. L'any 1994 li va ser atorgat el Grand Prix Pierre Süe de la Société Chimique de France. El reconeixement internacional es palesà també el 1999 amb l'ingrés a la International Academy of Quantum Molecular Science, selecte grup d'un centenar de científics, els més reconeguts de l'àmbit.

Ha dirigit nombroses tesis i molts treballs d'investigació, de màster i de DEA. Ha tingut nombrosos col·laboradors, tant al laboratori de Toulouse

com de fora. Permetin-me, els qui avui són aquí, que no desgrani noms, la llista seria inacabable. Voldria, no obstant això, compartir amb tots el record per un autèntic referent d'aquell grup, Jean-Pierre Daudey, que ens va deixar ja fa uns anys.

Un aspecte particularment rellevant del professor Malrieu ha estat la capacitat de construir escola de coneixement, no només pel nombre de doctors que ha format sinó en particular pel nombre d'investigadors que han fer estades al Laboratoire de Physique Quantique, els quals han adoptat els mètodes proposats per ell o les formes d'anàlisi suggerides. El caràcter de tot el grup —gens convencional, molt acollidor i jovial— i, naturalment, l'intercanvi científic sempre enriquidor, incitaven a tornar-hi; es pot dir que fidelitzava. El treball intens no impedia aprofitar les postes de sol als marges de la Garona, descobrir alguns indrets secrets de les muntanyes veïnes o participar en la verema de la vinya d'algun company. Aquest mateix esperit va imperar al llarg dels anys en les trobades científiques informals organitzades de forma periòdica al castell de Couiza, en un poblet abandonat del Vallespir o al Maestrat. Sembla avui increïble com la nostra inventiva feia que una modesta acció integrada donés tant de si! En totes aquestes ocasions, el debat científic, a vegades força contundent, sempre va deixar temps per gaudir de l'entorn i de les persones.

Com ja se'n hauran adonat, el grup de Química Quàntica de la URV —i en particular jo mateixa— hem mantingut una col·laboració permanent amb el professor Malrieu i el seu grup des de mitjan dels vuitanta. Ens ha deixat una petja important, tant en l'aspecte científic com en l'humà. Avui una generació més jove perllonga els lligams entre els dos grups. Però no som els únics d'aquest costat dels Pirineus que hi hem mantingut col·laboracions. El que li deu la química quàntica espanyola es reflecteix en tot el que he indicat abans. Ha tingut també vincles molt estrets amb grups de les universitats de Barcelona, de València, Jaume I, de Sevilla, Politècnica de Cartagena, o Autònoma de Madrid, tots representats aquí avui. El seu paper en el desenvolupament de la química teòrica a Espanya li va ser reconegut amb el premi Catalán-Sabatier de la Real Sociedad Española de Química, que li va ser lliurat l'any 2003.

Les qualitats del professor Jean-Paul Malrieu no es limiten a les d'un científic brillant i creatiu, que ha reflexionat profundament sobre problemes del seu camp científic amb una enorme riquesa d'idees i fecunditat. És un científic que irradia passió pel seu treball i la comunica a qui té l'oportunitat

de tractar-hi. No és pas gens infreqüent que, tot just després del bon dia, anunciï: "Aquesta nit he tingut una idea..." Les preocupacions socials tampoc no són alienes a la seva trajectòria vital. Des de sempre, ha participat en debats en variats cercles, ha escrit les seves preocupacions del moment, almenys per a ell mateix i per a les persones més properes. El paper de la ciència en la societat ha estat una de les seves preocupacions, i darrerament ha recopilat el seu pensament crític en un parell de llibres que han tingut considerable èxit. El títol del segon ens pot donar un tast d'aquesta altra faceta seva: *La Science Gouvernée, Essai sur le Triangle Sciences, Techniques, Pouvoir* ('La ciència governada, assaig sobre el triangle ciències, tècniques, poder'). És, com veuen, una persona amb una inquietud intel·lectual sense límits, que encaixa en un perfil humanista poc freqüent avui, nostàlgic potser d'un saló il·lustrat del segle XVIII.

La solemnitat dels actes d'investidura es presta a mantenir cert protocol. Dispensin, doncs, que ara me'l salti i que m'adreci al professor Jean-Paul Malrieu en la seva llengua i de l'única manera que sé fer-ho, com l'amic que també és. Cher Jean-Paul, pour notre Université, pour la Faculté de Chimie, pour notre groupe de recherche et très spécialement pour moi, c'est un véritable honneur que tu aies accepté de faire partie des Docteurs Honoris Causa de l'Université Rovira i Virgili. La présence entre nous aujourd'hui de si nombreux collègues d'autres universités, la plupart très convenablement habillés, dont beaucoup ont été tes collaborateurs, prouve combien tous considèrent que cette « cause d'honneur » est absolument méritée. Nous savons bien qu'en acceptant tu as dû faire violence à ton naturel peu penché vers les conventions, nous espérons que tu te sentes bien entouré en ce moment.

Rector Magnífic, en la mesura que m'ha estat possible, he exposat els mèrits del professor Jean-Paul Malrieu. Crec, doncs, haver dit prou perquè amb la vostra autoritat li sigui atorgat el reconeixement als seus mèrits. Consegüentment, us demano que us digneu nomenar doctor honoris causa el professor Jean-Paul Malrieu i així incorporar-lo al Claustre de la nostra Universitat.

Moltes gràcies.