

## **Discurs d'investidura pronunciat pel Dr. Petrus W. N. M. van Leeuwen**

Rector Magnífic de la Universitat Rovira i Virgili, benvolguda professora Carmen Claver, digníssimes autoritats, benvolguts companys, professors, família, amics,

En primer lloc, vull fer constar el meu agraïment als nombrosos catalitzadors de la Facultat de Química —el degà, la directora del Departament, Dra. Anna Masdéu; els professors i doctors— i als altres departaments per haver iniciat aquest procés que acaba avui amb la investidura. També vull donar les gràcies al Consell de Govern de la Universitat Rovira i Virgili, que m'ha atorgat aquest gran honor.

Els últims quinze anys he col·laborat amb molts estudiants i doctors dels departaments de Química d'aquí, sovint amb èxit i sempre amb gran plaer. Aquestes activitats van començar amb una col·laboració amb la professora Carmen Claver, la meva padrina d'aquest acte a la qual dec molt.

Abans de passar a l'anglès per presentar la part científica, voldria dir algunes paraules en holandès per als tres més joves aquí presents. Ik zal nu een paar woorden in het Nederlands zeggen: Lieve Tessa, Lieke en Hugo, ik vind het ontzettend leuk dat jullie vandaag hier ook aanwezig zijn. Heel erg bedankt voor jullie komst; ik zal nu in het Engels verder gaan.

M'agradaria donar-vos les gràcies per ser aquí avui, als qui sou de per aquí, però sobretot als qui heu vingut expressament dels Països Baixos. Dono la benvinguda al professor Kees Vrieze, que va ser el meu primer instructor de pràctiques fa 50 anys i el meu company d'habitació durant el primer any que treballava amb Shell. I molts anys després, em va convèncer per incorporar-me a la Universitat d'Amsterdam. Quan es va jubilar, el vaig substituir com a cap de departament. Gràcies, Kees, pel teu suport durant tots aquests anys. Moltes gràcies també als meus col·laboradors del present i del passat, molts dels quals es troben entre el públic. Voldria fer esment especial a la Dra. Zoraida Freixa, per les nombroses contribucions durant els últims nou anys.

M'agradaria dir unes paraules sobre la catàlisi i el seu paper en el món per al futur. Ens hem de preguntar quins dels problemes del món tenen a veure amb les ciències físiques. Sentim a parlar d'aquests problemes cada dia, però no sentim a parlar ni de la química ni de la catàlisi (si no és que escoltem un químic). Els problemes són l'energia, els gasos de l'efecte hivernacle, els materials sostenibles, els nous medicaments i l'aigua.

### *Energia i gasos de l'efecte hivernacle*

Als països del nord d'Europa, segons tot el que llegim, el total de les emissions de gasos de l'efecte hivernacle es manté constant: l'augment en el CO<sub>2</sub> és compensat per la reducció dels altres gasos emesos. En els tres àmbits de l'energia —la calefacció domèstica, el transport i la indústria— encara es poden fer estalvis enormes malgrat tots els èxits de les últimes dècades. Segons alguns informes, encara es pot estalviar el 50% de les emissions de CO<sub>2</sub>, i la catàlisi hi pot tenir un paper amb la síntesi de materials. En la indústria hi ha molta feina per fer en la intensificació de processos i els nous catalitzadors en formen part, si bé totes aquestes mesures no es poden instal·lar immediatament i també impliquen un temps de recuperació de la inversió.

Pel que fa al transport, les emissions de gasos de l'efecte hivernacle, com els hidrocarburs i òxids de nitrogen, s'han reduït 20 vegades en les últimes dècades, la qual cosa es deu totalment a la catàlisi heterogènia i l'enginyeria. Imagineu-vos com hauria quedat l'atmosfera sense els convertidors catalítics ben controlats en els vehicles de gasolina; ja vindran altres motors. Gràcies als límits de velocitat, la reducció del pes dels cotxes i tota una sèrie d'altres canvis, la producció de CO<sub>2</sub> dels automòbils va augmentant molt menys del que s'hauria incrementat sense aquestes mesures. No obstant això, les emissions de CO<sub>2</sub> segueixen sent altes, entre altres coses perquè l'eficàcia d'un motor de combustió interna és només del 25% (en condicions ideals l'eficàcia d'un motor dièsel pot arribar al 40%). Recordeu que una gran part de la pèrdua ve imposada per qüestions termodinàmiques i no es pot evitar. En comparació, les centrals elèctriques de carbó poden operar a una eficiència del 60%. Abans del 2012 la UE exigirà que l'eficiència dels cotxes augmenti a 5 litres per 100 km. La innovació incremental ens ha portat millores importants, sobretot perquè es poden implementar sense trobar-hi gaire resistència.

Més endavant veurem que 40 anys de millores incrementals provoquen canvis dràstics. Però no seran suficients perquè, com tots sabem, les reserves de petroli són limitades i les emissions de CO<sub>2</sub> encara s'han de reduir molt més. Si tornéssim a utilitzar el carbó com a font per als combustibles líquids, la producció de CO<sub>2</sub>, fins i tot augmentaria. És millor passar del gas natural a líquids (GTL). No he esmentat encara l'enorme creixement en el consum d'energia que s'espera de les noves economies que es desenvolupen ràpidament. És necessària més innovació radical.

### *Bioenergia*

No considero que l'augment recent de la bioenergia sigui una innovació radical; adaptant i millorant la tecnologia actual podem utilitzar productes biològics per a l'energia. Pel que fa a la producció, però, pot provocar canvis radicals en el món. La catàlisi té i seguirà tenint un paper important en la modificació de productes naturals perquè es puguin utilitzar com a combustible per al transport. És probable que els catalitzadors utilitzats en els processos d'aquesta escala, amb aquesta barreja de substrats i poc valor afegit, siguin catalitzadors heterogenis més robustos. Però mai no diguis mai.

### *Rendiments estimats (en litres per hectàrea) d'olis vegetals<sup>1</sup>*

• Soja	500
• Llavors de colza	1,500
• Oli de palma	5,000
• Pinyó de l'Índia	4,000-20,000
• Algues	1,500-150,000!

L'objectiu de la UE per als biocarburants és que a finals del 2010 gairebé el 6% del combustible de transport ha de procedir de fonts biològiques. L'objectiu d'Holanda és el 10% de biodièsel per al combustible de transport el 2020. L'objectiu de la UE per al 2020 és del 20% d'energies renovables per a tots els tipus d'energia. El 2009, la Universitat d'Agricultura d'Holanda va presentar un informe al Parlament<sup>2</sup> en el qual explica que, si totes les terres agrícoles dels Països Baixos es fessin servir per al

millor cultiu per donar biodièsel, es podria produir el 12% del combustible de transport necessari per al país. Un exemple espanyol us podria ser interessant: si tota la terra utilitzada per a la viticultura actualment (4 milions de tones de vi per any o 0,6 l/m<sup>2</sup>) es destinés a la producció de biodièsel, es podria produir al voltant de 12-15% del combustible necessari per al transport. No crec que això sigui una proposta atractiva per a cap dels dos països! Necessitaríem tota la terra dedicada a la agricultura arreu del món amb una producció semblant a la de colza per produir prou combustible per al transport. Avui els biocarburants, que inclouen el bioetanol, representen l'1,5% del combustible del transport del món. Durant els últims cinc anys les actituds sobre la producció de biodièsel s'han tornat més realistes: amb una participació del 10% serà una font important, però el biodièsel produït a partir de la colza o oli de palma mai no podrà substituir el petroli. La preocupació mediambiental i els dubtes sobre la sostenibilitat van creixent. Un informe del Regne Unit (2009)<sup>3</sup> afirma que només la reutilització d'oli de cuina com a biodièsel pot tenir una sostenibilitat immediata, mentre que la substitució de terres de cultiu per colza trigarà 25 anys a recuperar el balanç de CO<sub>2</sub>. L'ús de les zones més àrides i de plantes que no són comestibles (pinyó de l'Índia) podria incrementar la provisió i alleujar la pressió sobre els preus dels aliments.<sup>4</sup>

### *Les algues per a biodièsel*

Les algues han estat estudiades en l'última dècada com una nova font de biodièsel; creixen ràpid i el contingut d'oli pot arribar al 60%. Les xifres de rendiment per m<sup>2</sup> varien de forma considerable i s'ha afirmat, però no s'ha verificat, que la producció de biodièsel per unitat de superfície pot ser deu vegades més gran que la d'oli de palma.<sup>5</sup> L'eficiència de la conversió de la llum solar amb les algues pot acostar-se a la dels dispositius d'energia solar, segons diuen, però l'eficiència global de l'energia i el CO<sub>2</sub> encara s'han de veure.<sup>6</sup> Mitjançant un bon control de les conques o canals artificials, diverses petites unitats de producció pilot han entrat en funcionament en els darrers anys. Les primeres propostes per iniciar la producció en aigües marines sembla que han estat abandonades, i, en la meua opinió de profà, aquest abandonament ha estat una decisió molt sàvia. Una fàbrica als Països Baixos combina la producció d'algues en els canals artificials amb l'ús dels purins dels porcs, encara que inicialment no tenia per objecte l'ús d'algues per a biodièsel. També als Països Baixos el cultiu de tomaques es combina amb el d'algues en els

espais buits entre les plantes als magatzems, en els quals el nivell de CO<sub>2</sub> es pot augmentar mitjançant l'addició de gasos de combustió d'una central elèctrica o d'una planta de fermentació. Cal tenir en compte el fet que si es comencen a produir les algues a una escala realment gran, es necessita més CO<sub>2</sub> del que es disposa a escala local i, per tant, la combinació amb les centrals elèctriques és fonamental. La producció a gran escala també requereix que es pari atenció, de manera sostenible, a les quantitats extremadament altes de subproductes. Pel que fa a la química, la catàlisi i l'enginyeria, això no implica una innovació radical i tenim cert dret a ser optimistes.

### *Innovació radical*

No obstant això, sí que cal innovació radical en qüestions del combustible dedicat al transport. Cal recordar l'objectiu de la UE per al 2020. Considero com a innovació radical del transport la utilització de piles de combustible, bateries i energia solar, que pot no sonar tan radical per a molts de vostès. No només es requereix molta innovació sinó que la implantació a gran escala trigarà molt més que la implantació de combustibles líquids. En tot això la catàlisi hi té un paper poc rellevant. Ara bé, se n'utilitza la base teòrica, per exemple, en la investigació de la producció d'hidrogen i oxigen a partir de l'aigua i l'energia solar, així com de la síntesi dels materials necessaris.

### *Materials, medicaments*

La química dels combustibles és senzilla perquè tracta amb un nombre limitat de productes, però la situació canvia radicalment quan parlem de materials químics, on la diversitat és enorme i el nombre de substàncies, extremadament alt. Chemical Abstract Services, la base de dades de compostos químics, va anunciar recentment que hi ha 50 milions de compostos registrats fins al moment; fa 10 anys la xifra era de només 20 milions. L'augment del 60% va ser a causa de les activitats de les empreses farmacèutiques. Es podria pensar que 50 milions és molt, però mirant el nombre de permutacions, no ho és. Prenguem, per exemple, un esquelet, un esquelet privilegiat, al qual es poden connectar 10 diferents grups petits en 8 posicions. Si ho fem, acabem amb 100 milions de compostos. Segons la bibliografia, els últims 10 anys s'han fet 2 milions de compostos nous d'aquesta manera, els quals no han estat ni catalogats ni registrats.

Els detalls i els petits canvis tenen molta importància en la química, com es mostra en el cas d'un fàrmac contra el càncer: només substituïnt un àtom d'hidrogen en l'Epotilona A per un grup metil en Epotilona B, l'activitat del fàrmac canvia en un factor de 500.<sup>7</sup> En comparació, el conegut taxol és molt menys actiu. Així doncs, pot ser que sigui necessari fer totes les variacions possibles de molècules. Considerem un projecte ambiciós en el qual el nostre punt de partida és la palitoxina. Té 64 àtoms de carboni amb una disposició espacial característica i tots els àtoms tenen dues disposicions espacials. Suposem que volem analitzar totes les possibles variacions en la quantitat d'1 gram en un assaig farmacològic. El nombre d'isòmers es veu aquí, i a part de la impossibilitat de dur a terme aquestes síntesis, no hi hauria prou carboni en els nostres boscos per fer-les totes. Segurament això us recorda la història de l'inventor del tauler d'escacs, Sissé Ben Dahir, i els grans d'arròs que va demanar com a compensació al rei Shirham. Les variacions en els materials són infinites i, sempre que hi hagi el desig de canviar els materials i medicaments o crear-ne de nous, la recerca continuarà.

#### *Quins criteris d'elecció vam seguir?*

El desenvolupament de la química ha estat determinat per la primera matèria disponible. Les primeres matèries principals han estat productes naturals que es deriven de plantes i animals i els productes fòssil (carbó, petroli i gas). La meua estimació és que el 90% o més dels materials químics que existeixen avui són derivats del petroli i representen aproximadament el 7% del petroli consumit. La majoria de les conversions (> 90% però el percentatge del nombre de processos és encara més elevat) requereixen la implicació de la catàlisi. La innovació incremental en alguns dels nostres productes bàsics, com el polipropilè o el polietilè, els "plàstics" més comuns, ha donat resultats impressionants. Una millora anual del 10-15% de la producció en kg per g de catalitzador va portar un canvi de 4 kg de polipropilè per g de titani el 1954 a les actuals 3 tones per g de Ti, mentre que per als catalitzadors homogenis de zirconi la quantitat és superior a 10 tones per g de Zr. Aquestes últimes xifres signifiquen que ja no cal separar el catalitzador del producte, la qual cosa suposa un gran estalvi en residus i energia. La font fòssil es pot substituir per fonts de bioenergia sostenibles de diverses maneres, però gairebé sempre impliquen modificar la catàlisi actual i més passos.

És una oportunitat<sup>8</sup> per buscar productes *nous* fabricats d'una manera més directa a partir de matèries primeres sostenibles i, encara que no de manera molt radical, un cicle perfectament “verd” requereix molts canvis. Això em recorda una proposta d'un delegat neerlandès (Van Dieren) al Club de Roma (1972). Va proposar que molts dels nostres productes finals haurien d'estar disponibles en règim d'arrendament i no de venda als clients, i al final de l'arrendament, el material s'hauria de retornar al fabricant, per promoure el millor reciclatge possible.<sup>9</sup> Les polítiques implementades a la UE actualment per a molts productes recorden aquest principi. En conclusió, per a materials a gran escala les nostres opcions són limitades i el nombre de permutacions atòmiques que ens ha de preocupar no és tan gran.

El nombre de molècules implicades en productes de química fina per a materials i medicaments és enorme i hem de ser llestos. En certa manera, se segueixen línies històriques, es busquen semblances, se segueix l'exemple de la bioquímica, s'estudien els mecanismes biològics per trobar molècules actives, les dades sobre les propietats s'estudien de diverses maneres, etc. Però malgrat tot això, sembla que molts descobriments són purament casuals. Fins ara s'han trobat poques molècules i probablement no val la pena estudiar-ne les propietats en profunditat, ni en el camp de la catàlisi ni en la farmacologia. Segurament serà més efectiu seguir fent assaigs amb molècules en un intent de trobar-ne una de nova de forma accidental. La catàlisi contribueix molt a la síntesi d'aquestes noves molècules; moltes conversions impensables fa una dècada ara són possibles gràcies als mètodes catalítics moderns.

La informatització ha accelerat enormement la investigació química. Sense les noves tecnologies, no es podrien registrar 4 milions de nous compostos a l'any, perquè fa un segle la caracterització de només un costava tot un any de síntesi de derivats per determinar-ne l'estructura. La recerca està produint resultats a un ritme cada vegada més elevat. Actualment els coneixements es divulguen sobretot per bases de dades, i arriben a un gran nombre d'investigadors a un ritme elevat. El coneixement de l'investigador, però, encara té el seu valor. És fàcil trobar “un” mètode de síntesi per a un producte determinat, però encara no s'ha resolt la qüestió de com trobar-ne el millor o el més sostenible. La informatització també té altres impactes. Per exemple,

la manera com aprenen els estudiants va canviant i, com sempre, els nostres mètodes d'ensenyament van quedant enrere.

És temptador comparar el desenvolupament de la ciència amb l'evolució de la vida,<sup>10</sup> sobretot pels canvis escalonats que hi ha de tant en tant i el fet que depèn molt de la casualitat. La ciència i la vida no admeten comparacions, i fins i tot aquells avenços en la ciència de la catàlisi que s'anomenen evolució dirigida no mostren les característiques de l'evolució darwiniana. A banda del fet que el canvi científic sembla un bilió de vegades més ràpid que l'evolució, els resultats sobreviuen en el temps en gran part perquè nosaltres volem que sobrevisquin, i la fertilització creuada, tan important en la ciència, és impossible, per definició, entre diverses espècies al llarg de l'evolució. En el millor dels casos, el canvi científic té característiques lamarckianes, ja que els coneixements adquirits es passen a la generació següent. Bé, així ho esperem!

Al llarg d'aquestes paraules he volgut transmetre un missatge implícit, encara que reconec que molt possiblement ja n'esteu convençuts. El meu lema sempre ha estat que al final d'un projecte d'investigació, en cas d'èxit, hi hauria d'aparèixer alguna cosa útil per a la societat. No importa fins a quin punt la nostra recerca ha estat impulsada per la curiositat o com en siguin de bonics els resultats científics; després de tot la societat vol progressar, encara que això no sempre quedi clar de forma immediata. Certament, això sempre ha estat la motivació i la justificació de la catàlisi a Europa. Avui en dia aquest principi es pot aplicar a la química en general i les propostes de la UE l'han de respectar. En alguns àmbits segueix sent un tema de debat, però me n'alegro que a Tarragona hi ha consens. La catàlisi pot ser elegant, però al mateix temps ha de proporcionar aplicacions pràctiques. Ha estat i seguirà sent un dels temes de recerca més importants perquè és l'únic mitjà racional pel qual es poden produir compostos útils d'una manera econòmica, estalviant energia, i respectuosa amb el medi ambient.<sup>11</sup>

La situació a Catalunya és molt favorable: el percentatge del PIB destinat a recerca va creixent ràpidament, mentre que es redueix molt als Països Baixos. A més, l'interès que mostra el públic en general i els polítics és molt encoratjador, i és un



honor i un plaer formar part d'això, i més encara, des que avui m'he incorporat a l'*Alma Mater*, el Claustre, de la Universitat Rovira i Virgili.

Aquesta situació favorable de la recerca ens dóna confiança en el futur, tenint en compte les tasques que tenim al davant, com acabem d'esbossar una mica. Això és encoratjador perquè el “demà comença avui”. Gràcies.

---

<sup>1</sup> Les xifres publicades varien de forma considerable.

<sup>2</sup> P. Bindraban, E. Bulte, S. Conijn, B. Eickhout, M. Hoogwijk, M. Londo, *Climate Change, Scientific Assessment and Policy Analysis; Can biofuels be sustainable by 2020?* WAB 500102 024, Wageningen, **2009**.

<sup>3</sup> P. Upham, P. Thornley, J. Tomei, P. Boucher, *Substitutable biodiesel feedstocks for the UK: a review of sustainability issues with reference to the UK RTFO*, *J. Cleaner Production*, asap, **2009**.

<sup>4</sup> L.O. Fresco, *Biomass, food & sustainability: Is there a dilemma?* Rabobank, **2007**. Fresco, l'exvicedirector general del Departament d'Agricultura de la FAO declara que els increments recents en els preus d'oli vegetal i de blat de moro (2007) no es deuen a la demanda per a biocombustible. A més, els preus van tornar als nivells de 1995.

<sup>5</sup> Y. Chisti, Biodiesel from microalgae. *Biotechnol. Adv.* **2007**, 25, 294–306.

<sup>6</sup> L. Reijnders, Microalgal and Terrestrial Transport Biofuels to Displace Fossil Fuels, *Energies* **2009**, 2, 48.

<sup>7</sup> <http://en.wikipedia.org/wiki/Epothilone>.

<sup>8</sup> [http://www2.dupont.com/Renewably\\_Sourced\\_Materials/en\\_US/assets/DuPont\\_Renewably\\_Sourced.pdf](http://www2.dupont.com/Renewably_Sourced_Materials/en_US/assets/DuPont_Renewably_Sourced.pdf)

<sup>9</sup> a) Un versió més moderna: “Cradle to Cradle: Remaking the way we make things”, W. McDonough, M. Braungart, North Point Press, **2002**. b) W. van Dieren on C2C (Cradle to Cradle):

[http://www.waste3c.org/files/23830/03\\_Presentation\\_Mr.\\_W.\\_van\\_Dieren.pdf](http://www.waste3c.org/files/23830/03_Presentation_Mr._W._van_Dieren.pdf)

<sup>10</sup> S. J. Gould, *Life's Grandeur*, Jonathan Cape, London, **1996**, p. 217–230.

<sup>11</sup> R. Noyori, *Nature Chemistry*, abril 2009, 1.