

“L’home ha estat creat co-creador i l’evolució està ara en les seves mans”

Una vida dedicada a la recerca, a la docència i, sobretot, a l’home. Trenta-cinc anys després de la seva primera estada a París, al Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée, Juan Bertran i Rusca es jubila. Bertran ha estat el fundador del Grup de Química Teòrica de la UAB i un dels principals responsables i impulsors de l’enorme desenvolupament que la química teòrica ha aconseguit a Catalunya i a l’Estat espanyol. En aquests anys, ha publicat més de 240 articles d’investigació en diferents revistes científiques internacionals, ha estat i és membre del consell editorial de diverses publicacions nacionals i internacionals, i el seu nom té prestigi reconegut entre els grups de química teòrica d’arreu.

Va estudiar Enginyeria Industrial, Filosofia i Teologia, i Químiques. Què el va moure cap a aquests estudis?

Quan vaig acabar el Batxillerat l’any 1948 vaig començar Enginyeria Industrial. Era una carrera molt cotitzada, ja que els ingressos econòmics d’enginyer tenien molta importància. Vaig anar a l’acadèmia Fabrè, a la Rambla de Catalunya, on ens feien treballar tant que els diumenges també teníem classe. L’examen consistia a resoldre diferents problemes, pretenien que aprenguéssim a aplicar els coneixements. Per tradició familiar, a mi m’atreia aplicar la ciència a l’enginyeria, fent coses pràctiques amb una base científica sòlida. Després se’m va ocórrer fer-me jesuïta i vaig començar a estudiar Filosofia. Havia acabat els primers anys d’enginyer i hagués pogut fer la carrera, però amb la meua base científica i en una institució com la jesuïta, dedicada a la docència, l’enginyeria no tenia tant interès. Així que podia fer Físiques o Químiques, però aquell no era pas el millor moment de la Física a Barcelona. A més, com els jesuïtes tenien l’Institut Químic de Sarrià (IQS) també tenia més possibilitats en aquest camp. La Química m’agradava, però va ser també una mica conjuntural. Després d’acabar Químiques vaig finalitzar Teologia i, aleshores, vaig anar a fer el doctorat a París.

Com va ser la seva estada a París?

M’havien designat professor de Filosofia de la part de Cosmologia i totes les relacions amb les ciències a la facultat eclesiàstica de Filosofia, a Sant Cugat, que més tard va tancar. Per aquest motiu, vaig anar al Centre de Mecànica Ondulatòria Aplicada (CMOA) de París amb Raymond Daudel, perquè la mecànica quàntica és de les coses que té una problemàtica filosòfica més interessant. El CMOA era un centre molt important en aquell moment. Estava en el seu moment àlgid i hi havia un nivell altíssim. Teníem un seminari cada setmana i quan arribava la primavera venien tots els americans, probablement també per veure París. Cada principi de curs assistia de Broglie, el Nobel de Física francès de mecànica quàntica que té la hipòtesi del dualisme partícula-ona. Daudel era el seu deixeble i es va dedicar a la Química perquè es veïés la potencialitat d’aquestes idees en aquest camp. D’altra banda, durant l’estiu del 68 es van crear moltes universitats lliures que els mateixos alumnes promovien. S’organitzaven reunions molt divertides en les quals es tractaven temes com la llibertat dels electrons i problemes epistemològics en els postulats de la mecànica quàntica.

A París, hi vaig fer el doctorat de tercer cicle. Era el maig del 68 i vaig haver de defensar la tesi envoltat de la policia a la facultat de Ciències. Va ser



JORDI PARETO

el mes més divertit que he passat en la meua vida. Més tard vaig tornar a Espanya i vaig passar la tesi a la Universitat de Barcelona. Em vaig trobar en la mateixa situació en què es troben actualment tants joves que estan a l’estranger, que la feina és quan tornen. Em va resultar un pèl difícil entrar en els grups d’aquí, hi tenia bona relació però no era part del grup. La veritat és que he recorregut moltes universitats. Primer vaig estar a l’Institut de Biologia Fonamental de l’Autònoma com a becari de reinserció i després em va fitxar Fernández Alonso per anar a la Universitat Autònoma de Madrid com a professor adjunt. Més tard vaig guanyar l’agregadoria a Oviedo, i un any després vaig tornar d’agregat a la Universitat Autònoma de Barcelona. El 1980 vaig anar de catedràtic a Sevilla i, a la fi, vaig tornar a l’Autònoma de Barcelona. Jo sempre dic que m’havien d’haver fet ministre d’Educació perquè sóc el que coneix millor les universitats espanyoles, oi?

Juntament amb Ramon Carbó-Dorca i Santiago Olivella, van crear les bases de grups de recerca actuals en química teòrica a Catalunya. Com van ser els inicis?

Mentre jo estava al laboratori a París, en Ramon Carbó-Dorca havia començat la línia de química quàntica a l’IQS, mentre que el Santiago Olivella havia anat amb el Michael J. S. Dewar. Amb el Ramon vam estar junts a l’IQS

un parell d'anys. Després a l'Institut no li interessava tants químics teòrics, ja hi havia el Ramon i per tant jo no hi feia falta. L'Olivella, per la seva banda, va anar al Consell Superior d'Investigacions Científiques i després es va involucrar més amb la Universitat de Barcelona, i així va començar una mica el moviment de la química quàntica. Això ha agafat una volada tremenda, a Catalunya hi ha una densitat de químics quàntics i teòrics importantíssima i de bon nivell. Al desenvolupament de la química teòrica catalana hi ha contribuït també enormement el Centre de Supercomputació de Catalunya, perquè ha permès fer uns càlculs cada cop més importants.

En quina situació es trobava la ciència a l'Estat i, concretament, la química teòrica?

Quan fèiem la carrera hi havia un llibre de Charles Alfred Coulson, *Valence*, que a tots ens agradava molt. En aquest llibre es començava a aplicar la mecànica quàntica per dilucidar i clarificar conceptes de la química. No era massa matemàtic, sinó més aviat qualitatiu, però la veritat és que en aquell moment a les llicenciatures de químiques d'Espanya no hi havia res d'això. Començava a haver-hi interès més que un ensenyament sistemàtic.

Tota la química quàntica, i després la teòrica, donava una explicació als fets químics que a tots ens agradava. Però el coneixement de química quàntica era realment acadèmic, no teníem potència de càlcul per arribar als problemes reals de la química. Fèiem més el que podíem que no pas el que volíem. L'enginy estava a trobar un treball realitza-

ble i que tingués certa repercussió. Amb el temps, l'evolució metodològica de la química teòrica, i sobretot el boom dels ordinadors, van fer canviar l'època. Les simulacions amb ordinador van permetre tractar la problemàtica del món fenomenològic i va suposar un pas més per tractar la problemàtica realista de la química. Com va dir encertadament l'Acadèmia sueca quan li va donar el premi a John A. Pople i a Walter Kohn l'any 1998, gràcies al boom de la química teòrica la química ha deixat de ser una ciència purament experimental. Els laboratoris químics tindran al costat el laboratori d'ordinadors, és el que podem anomenar la química seca. Avui dia, en tots els camps de la química teòrica trobem grups catalans, i a això hi ha contribuït enormement la potència de càlcul del CESCA.

L'obertura del congrés va anar a càrrec de Josep Maria Lluch, delegat del rector per a Afers Acadèmics i Centres Adscrits i cap del Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques del Dept. de Química de la UAB; David Serrat, director general de Recerca del DURSI; Lluís Ferrer, vicerector adjunt al rector; Antoni Méndez, degà de la Facultat de Ciències, i Josep Ros, director del Dept. de Química. Lluch va afirmar que aquest congrés dedicat al Dr. Bertran era "una modesta manera de donar-li les gràcies per una vida dedicada al desenvolupament de la ciència i a l'ensenyament de noves generacions". David Serrat va afirmar que Bertran "és un gran científic, un aspecte només superat per la seva gran humanitat". Opinió compartida per Lluís Ferrer, qui va dir de Bertran que és "un bon científic i una bona persona", així com "una de les personalitats més importants de la comunitat acadèmica".

La conferència inaugural va anar a càrrec de Santiago Olivella, de l'Institut d'Investigacions Químiques i Ambientals de Bar-

Cimera de químics teòrics en honor a Juan Bertran



JORDI PARETO

Del 19 al 21 de setembre la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) va acollir el congrés sobre química teòrica *Electronic Structure and Chemical Reactivity. An International Symposium in Honor of Prof. Juan Bertran*. Aquest congrés, organitzat pel Grup de Química Teòrica del Departament de Química de la Universitat Autònoma de Barcelona, ha estat un homenatge al doctor Juan Bertran, fundador d'aquest Grup de Química Teòrica a la UAB i un dels principals responsables i impulsors de l'enorme desenvolupament que la química teòrica ha aconseguit a Catalunya i a l'Estat espanyol.

celona (CSIC), qui va fer una anàlisi exhaustiva de l'evolució de la química teòrica a Catalunya al llarg dels darrers disset anys a través de les presentacions que els diferents grups de recerca dels Països Catalans han fet en les diferents edicions del seu congrés anual. Per a Olivella, el creixement espectacular del nombre d'investigadors catalans en aquest camp de recerca en els darrers anys (l'any 1985 només n'hi havien 31 i actualment s'hi dediquen 173 científics), és degut a l'existència de grups de recerca multidisciplinars, al reconeixement internacional dels treballs presentats, la forta fe en la química teòrica, l'entusiasme de les noves generacions i el suport computacional creixent rebut per part del CESCA.

El congrés va comptar amb la participació dels més destacats experts internacionals de química teòrica, com Evert J. Baerends, Michael A. Robb i Tom Ziegler, així com també procedents de tot l'Estat. Van ser 16 conferències distribuïdes en tres dies, gairebé un centenar de pòsters presentants i més de 150 científics d'arreu del món com a assistents.

Quina percepció tenia de l'evolució de la tecnologia i de la química quan va començar a treballar?

Si comences a fer un estudi teòric i la molècula que estudies és l'hidrogen, la més petita que hi ha, amb dos electrons, evidentment això té molt interès teòric però escassa incidència als problemes reals. Ja des del principi teníem l'aspiració de fer química real, però és clar, havíem d'utilitzar uns models senzills i adequats a la potència de càlcul de què disposàvem.

El que ha estat més novedós ha estat el boom de la informàtica. Necessitàvem calcular i desitjàvem tenir potència de càlcul, però no era previsible un desenvolupament tecnològic tan important. En aquell moment, fins i tot amb el mètode Hückel, que era molt senzill, havíem de posar molts conceptes de simetria per poder-ho resoldre. Com en totes les situacions en què disposes d'armes menys potents, havies de ser més potent amb el cervell.

Enguany el CESCO celebra el seu desè aniversari. Com recorda els inicis del Centre de Supercomputació de Catalunya?

En la creació del Centre hi va haver una decisió política encertada. L'evolució de la informàtica ha permès que cada cop es puguin fer més càlculs amb PC i estacions de treball. Avui dia els grans centres de càlcul han quedat amb una potència molt més gran, amb un decalatge de velocitat, potència, memòria... Crec que va ser un gran encert dotar a Catalunya d'un centre de supercomputació, perquè no quedi enrere. El problema de la informàtica és que hi ha molt dinamisme en l'augment de potència. En crear el centre de càlcul es podia pensar que una inversió forta seria la gran inversió i no és així. Si d'alguna cosa et convences amb la informàtica és que s'ha de fer una inversió constant perquè els equips queden obsolets al cap de dos anys. Quan surt el TOP500 t'adones que si no adquireixes nous computadors aviat surts de la llista. Estar-hi suposa un esforç d'inversió constant.

Els químics teòrics catalans estem en competitivitat amb els millors químics americans i, per tant, no pots retardar una recerca per manca de potència o fer treballs de segona categoria. Disposar d'un bon equipament

de supercomputació permet estar en un nivell totalment competitiu, sinó hauríem de buscar problemes adequats a la nostra potència de càlcul i no al problema real. Una de les coses que avui dia crida l'atenció dels grups de química teòrica catalans és la seva enorme inserció en els problemes reals de la química. Ha evolucionat molt. Recordo les primeres reunions de químics quàntics catalans, tot era més metodologia, paper i llapis. A les reunions es fa evident el nivell d'especialització que hi ha als diferents grups, perquè s'han introduït en els problemes reals.

Quins projectes de recerca destacaria des d'un punt de vista social?

Avançar en la solució d'un problema real sempre té beneficis socials. La química és al centre de molts problemes reals, en l'alimentació, la salut, la medicina i en tots els processos bioquímics en els que podem influir. Crec que



JORDI PARETO

El doctor Juan Bertran té 270 publicacions, la major part en les revistes científiques internacionals de més prestigi (*Journal of the American Chemical Society*, *The Journal of Physical Chemistry*, *Inorganic Chemistry*, *Journal of Organic Chemistry*, etc.), ha estat editor de quatre llibres, autor d'un (*Química Cuántica. Fundamentos y aplicaciones computacionales*) i en té un altre en preparació. La seva tasca ha estat reconeguda darrerament amb la nomenació com a Doctor Honoris Causa de la Universitat de Nancy (França, 2001) i, anteriorment, va ser guardonat amb el Premi de la Fundació Catalana per a la Recerca (1992) i la Medalla Narcís Monturiol de la Generalitat de Catalunya (1996). ■

més o menys la meitat de la investigació mundial ara es fa en el camp de la biologia molecular. La química està present en els problemes que més preocupen a la societat.

En tots els camps hi hagut un desplaçament cap a la temàtica biològica, perquè és clar que serà un punt decisiu, particularment en el genoma i en la millora de la qualitat de la vida humana. Jean-Marie Lehn, Nobel francès de 1987, defineix el químic com l'arquitecte de la matèria. La veritat és que entendre i dominar la matèria és poder. El coneixement sempre és poder i acaba convertint-se en acció. Quan es domina una cosa es pot jugar amb ella, fer estructures inèdites, no presents a la realitat.

Això no pot entrar en conflicte amb la religió?

La religió es pot entendre de moltes maneres i cadascú té la seva pròpia visió de Déu. Estic totalment d'acord amb molts ateu i agnòstics perquè protesten en contra d'una determinada visió de Déu, que pot ser molt qüestionable, perquè cadascú el maneja al seu benefici i està clar que no se'l pot manejar. Estic convençut de l'evolució, que avui dia és gairebé una evidència científica. La creació de Déu ha estat a través de l'evolució natural. Hi ha uns mecanismes evolutius que treuen immediatesa a la creació i precisament aquí entra l'home. A l'arribar l'home, l'evolució biològica entra en simbiosi amb l'evolució cultural. L'evolució ara és a mans de l'home, precisament perquè hi ha hagut aquest desenvolupament cultural... L'home, que està fet a imatge de Déu, és creat co-creador. Hi ha un autor que diu que la creació és perfectament imperfecta, o sigui, no ha acabat. Crear és una de les tasques de l'home, i de l'enginyer precisament. Aquesta era una de les coses de l'enginyeria que m'agradava quan era jove. *L'homo sapiens* és també *homo faber*, l'home que fa coses i necessàriament ser tècnic és essencial en la natura humana, per tant, no entra en contradicció amb un Déu creador, sinó que realitza el projecte inicial de Déu. Hi ha una frase poètica que diu que "Déu crea com el mar crea la platja, retirant-se", deixant tota la responsabilitat sobre nosaltres per culminar la seva obra. Els problemes estan per resoldre'ls, és el paper que ens toca. ■