



VNIVERSITAT DE VALÈNCIA

Investidura como Doctor "Honoris
Causa" por la Universitat de València a
Björn Olof Roos

Laudatio

Valencia, 27 noviembre de 2007



Ecxmo.y Magfco. Sr. Rector

Ecxmo. Sr. D. Björn Roos

Excmas. e Illmas. Autoridades Académicas,

Sras y Sres. Profesores, Estudiantes y Personal de la Universidad

Sras y Sres.

En el día de hoy la *Universitat de València* honra con un acto de la máxima trascendencia académica a sus nuevos doctores y a algunos de sus más eminentes profesores. Futuro y tradición se unen con ello para lograr unos objetivos comunes que se hallan en la esencia del espíritu universitario: la creación y la transmisión del saber. El protagonista de la presente *Laudatio*, el doctor Björn Olof Roos, profesor emérito de Química Teórica en la Universidad de Lund, Suecia, sobresale en ambos aspectos. Por ello, y antes de exponer sus méritos, estas palabras iniciales son de felicitación al profesor Roos por su incorporación a nuestra comunidad universitaria como doctor *Honoris Causa*, felicitación que hago extensiva al resto de homenajeados.

Compendiar en pocas palabras la trayectoria científica y humana del profesor Roos no es sólo una tarea compleja sino injusta, puesto que su contribución, más allá de los logros tangibles y clasificables, se halla sobre todo en su capacidad para transmitir a sus semejantes su entusiasmo por el descubrimiento y su perenne compromiso con el rigor y la verdad, cediéndonos lo que, en palabras de Hodding Carter, son los dos legados más perdurables que podemos transmitir a nuestros hijos: raíces y alas. Björn Roos ha puesto su trayectoria vital al servicio de la Ciencia como forma de adquisición de conocimiento y asimismo como el instrumento de su difusión a las nuevas generaciones, y lo ha hecho con pasión, como una simple extensión de su apasionamiento por la vida en todas sus facetas, como bien sabemos aquéllos que le conocemos.

Los sentimientos de un investigador tras una larga carrera científica han de ser necesariamente contradictorios. El frío análisis de los avances en el conocimiento que se han producido en las últimas décadas en cualquiera de las áreas científicas nos impele al asombro y la satisfacción; al desánimo por el contrario la certeza de que el



camino no ha hecho sino comenzar, que muchos principios fundamentales nos siguen siendo desconocidos y que, sea cual sea el grado de progreso alcanzado, la Ciencia en manos humanas crea tantos beneficios como perjuicios, al mundo en general y a la humanidad en particular.

Y es que hay ciertas renunciaciones implícitas cuando se centra en la Ciencia el ansia personal por la exploración del mundo. La fundamental nos lleva a abdicar de los referentes absolutos, a abandonar humildemente la creencia en una Ciencia immaculada e infalible, a asumir su condición íntima de obra humana, imperfecta, inconclusa, abierta al cambio de paradigmas, y, en definitiva, a vivir siempre en la frontera, sin libro de instrucciones. Los objetivos de la Ciencia son ambiciosos; como decía Pascal, abrazar al Universo y dotar al ser humano de un conocimiento que pueda emplear en su beneficio. Las herramientas son sin embargo a la vez modestas e inmarcesibles. La Ciencia cimenta su estrategia en la convicción de que el Universo posee una estructura matemática y en la fuerza del experimento como fuente de adquisición de conocimientos sobre la realidad. A través del lenguaje matemático el científico trata de formular su noción de la Naturaleza con un número mínimo de sentencias, simples para ser comprensibles y capaces a su vez de representar la complejidad y el caos. Todo resultado práctico obtenido en el laboratorio ha de pasar necesariamente a través del tamiz de la teoría si se aspira a comprender el fenómeno que involucra y proyectarlo hacia nuevas metas de conocimiento. De la complejidad al orden y del orden al caos a través de ecuaciones simples y bellas, como postulaba Albert Einstein. Modestas herramientas, decíamos, con las que comenzamos ya hoy a predecir el clima, a completar ciclópeas obras de ingeniería, a desentrañar la estructura íntima del Cosmos y de la materia, y, en lo que nos concierne hoy aquí, a comprender y elucidar procesos químicos elementales o complejos.

Björn Roos pertenece a una generación de científicos que ha sido protagonista y responsable de una pacífica invasión, la de las matemáticas sobre la química, una incursión *animus remanendi*. Fue junto a un pequeño grupo de colegas en todo el mundo que imaginaron, crearon y plasmaron la estructura de una ciencia nueva. Hace décadas que tenemos en nuestras manos la ecuación de Schrödinger-Dirac, el fundamento de la mecánica cuántica, capaz de predecir exactamente el



comportamiento de núcleos y electrones en el átomo, la formación y destrucción de enlaces entre átomos para dar moléculas, la interacción entre las mismas para producir reacciones químicas. La complejidad en la resolución de las ecuaciones ralentizó sin embargo la utilidad de la química teórica hasta la llegada de los ordenadores, que representaron un punto de inflexión en todos los campos de la Ciencia al que la química no fue ajena. Hubo entonces que diseñar programas de cálculo capaces de resolver las ecuaciones de la mecánica cuántica para el caso químico de forma numérica, aproximada pero cada vez más precisa, y ello requirió la creación de todo un nuevo mundo de conceptos y estrategias matemáticas y computacionales al que el profesor Roos contribuyó desde sus orígenes.

Heredero de la fecunda escuela de teóricos escandinavos como Ingrid Fischer-Hjalmars y Per-Olof Löwdin, Björn Roos ha acompañado a la química cuántica de la niñez a la adolescencia, y de ahí a su madurez, interesándose a la vez por dotar a la disciplina de las herramientas metodológicas imprescindibles para su avance y por desentrañar problemas químicos concretos en todo tipo de sistemas, desde átomos y moléculas diatómicas hasta fragmentos proteínicos y compuestos organometálicos, de espectros electrónicos a desplazamientos químicos, de propiedades magnéticas al estudio de la reactividad orgánica e inorgánica, destacando sus estudios espectroscópicos en moléculas orgánicas y con metales de transición, en la química de elementos pesados, lantánidos y actínidos, y en la descripción de nuevos tipos de enlace químico. Avalan su trayectoria cientos de artículos científicos y un buen número de libros y capítulos de libros, así como el haber sido honrado con diferentes galardones internacionales, y, cómo no, su incansable labor en el comité Nobel de Química de la Academia Sueca de las Ciencias.

Es posible, aunque sea un pálido reflejo de su trayectoria, enumerar ciertos hitos en la carrera del profesor Roos que lo convierten en uno de los químicos cuánticos más relevantes de su generación, comenzando por su implementación del procedimiento de interacción de configuraciones directa en 1972, que abrió la puerta para la introducción de la correlación electrónica, y con ello a la predictibilidad, en los cálculos químico-cuánticos. A finales de dicha década Björn Roos y sus colaboradores desarrollaron el método CASSCF, fundamento de la química-cuántica



multiconfiguracional, un procedimiento de cálculo imprescindible e insustituible para la obtención de funciones de onda correctas en el tratamiento de numerosos sistemas y procesos químicos complejos en los que la proximidad entre estados electrónicos hace inviable el uso de otras metodologías, como en el estudio de la espectroscopia y los estados excitados moleculares, la descripción de estados energéticos degenerados o los procesos de disociación y el estudio de los metales de transición. Por vez primera se dotaba con ello a la química cuántica de generalidad para todo tipo de problemas de estructura electrónica, y el procedimiento pasó formar parte de las herramientas imprescindibles de muchos químicos teóricos.

En un salto adelante hacia la precisión en las predicciones teóricas, el final de la década de los 80 vio cómo de nuevo Björn Roos y nuevos colaboradores ampliaron la aplicabilidad de los métodos multiconfiguracionales con el desarrollo de la teoría perturbativa de segundo orden mediante el método denominado CASPT2. Fue entonces cuando se inició la estrecha y fructífera vinculación del profesor Roos con la *Universitat de València* a partir de su colaboración con la profesora Manuela Merchán, y que llegó a incorporar a un buen número de investigadores. Aquí en Valencia, Björn Roos encontró una inusualmente larga tradición investigadora de renombre internacional en Química Teórica que se remonta a los años 50 y al esfuerzo del profesor José Ignacio Fernández Alonso y sus discípulos, y que prosigue con aquéllos que han sabido mantener viva la llama de la investigación en el área. El entusiasmo y esfuerzo sinérgico de los grupos de las Universidades de Lund y de Valencia en el desarrollo de estrategias computacionales en el campo de la química cuántica multiconfiguracional y en la elucidación de problemas espectroscópicos representó un salto cuantitativo en el área que los convirtió en referente mundial, y que perdura en nuestros días en nuestra dedicación a la fotoquímica teórica.

Finalmente, como uno de los grandes logros científicos del profesor Roos, debemos mencionar su particular esfuerzo por difundir y hacer inmediatamente asequibles a la comunidad investigadora sus avances teóricos, lo que le llevó liderar un nutrido grupo de científicos en la elaboración de un conjunto de programas de cálculo químico-cuántico, agrupados bajo el nombre de MOLCAS, mediante los cuales los químicos



teóricos pueden desarrollar su labor. Es este un notable esfuerzo científico que redundará mucho más en beneficio común que propio.

No quisiera concluir sin destacar que no sólo homenajeamos hoy a Björn Roos como revolucionario de un campo de la ciencia concreto. La tarea más noble y necesaria del científico es la de ser transmisor de conocimientos, en definitiva, su carácter de maestro, una condición que en el profesor Roos adquiere su significado más amplio. Al gran número de discípulos que junto a él han completado sus estudios de graduación, doctorado y postdoctorado, a los cuáles ha dedicado mucho de su tiempo, paciencia, experiencia y entusiasmo, se unen los innumerables alumnos de las escuelas europeas de química teórica que lleva organizando desde 1989, por las que han pasado casi dos generaciones de químicos y físicos teóricos, y que han sido referente para la ciencia europea de las últimas décadas. El avance científico es – como siempre lo ha sido - una tarea colectiva, en la cual el conocimiento ha de ser puesto en las manos y las mentes de quienes nos rodean, y especialmente quienes nos suceden. Sin escuela sobre la que apoyarse no hay progreso. Condensado en una frase de Bernard de Chartres, vemos más porque caminamos sobre los hombros de gigantes. Podemos otorgar a Björn Roos el carácter de tal, y considero que la concesión por tanto del doctorado *Honoris Causa* por nuestra Universidad está ciertamente justificada.

El lema de la también secular Universidad sueca de Lund reza: *ad utrumque*, preparados para ambos, el saber y la lucha, lo que, entendido en términos modernos podemos interpretarlo como una defensa del conocimiento y de su influencia sobre la humanidad. Bajo el resplandor de los avances en la física, la biología y la medicina modernas, a la química le ha tocado jugar el papel de acompañante incómodo y desvaído. Omnipresente en la vida cotidiana y protagonista en muchos de los terrenos científicos, la reputación de la química sigue injusta e indisolublemente unida a la de la contaminación o el saqueo de recursos naturales, mientras sus avances quedan reducidos al mundo de los especialistas. Los que estamos cercanos a ella sabemos que la química se halla en puertas de una nueva era en la que el conocimiento y control de los procesos químicos, esta vez realizado átomo a átomo y molécula a molécula, expande un universo de nuevas posibilidades. La ingeniería molecular y la



nanotecnología se abren paso día a día con la fabricación de máquinas moleculares, el control de procesos a pequeña escala, el diseño inteligente de nuevos fármacos. Protagonista básico del nuevo sendero, la química cuántica nos permite llevar al ordenador - a través de las ecuaciones matemáticas - a los fenómenos moleculares, analizarlos y comprenderlos, a realizar simulaciones y predicciones cuantitativas y concluyentes que guíen, complementen y promuevan nuevos avances en el laboratorio.

Es esa la herencia que nos lega el profesor Roos, y junto a ella su convicción de que el científico debe responsabilizarse de las consecuencias de su cometido y hacer oír su voz, lo que no deja de ser una actitud poco frecuente. El estruendoso silencio que en muchos casos nos autoimponemos los investigadores y académicos se convierte casi siempre en una notoria dejación de funciones. Pensamos que lejos del mundanal ruido la Ciencia será aséptica e incorruptible, y rara vez es así. Como deseaba Joan Manuel Serrat, *sería fantàstic que la Ciència fos neutral*. Está lejos de serlo. Nos hemos acostumbrado en demasía a un mundo que busca la rentabilidad a corto plazo, que arrincona todo aquél conocimiento que no produzca un objeto de consumo inmediato, y que atesora el saber como fuente de control y dominio. La Ciencia no será neutral hasta que recupere el espíritu universal y altruista que le es propio; no lo será hasta que los que tenemos la responsabilidad de devolvérselo abandonemos la neutralidad y olvidemos la autocomplacencia, el silencio del laboratorio o la pugna por el reconocimiento efímero. Nos compete esa responsabilidad en todas sus facetas, como salir en defensa del planeta, exigir que los medicamentos que desarrollamos lleguen a todos, investigar para aquéllos que no pueden financiarnos; nos compete ante todo universalizar el conocimiento, el verdadero gran patrimonio de la humanidad. Me consta el compromiso del nuestro ilustre homenajeado en todos estos sentidos, y es por tanto una más de las razones por las que creo que este galardón le honra tanto al él como a nosotros. Demos pues una cálida enhorabuena al profesor Björn Roos y acojámoslo en el claustro de la *Universitat de València*.

Välkommen till Valencia Universitet och tusen Tak Professor Roos!



VNIVERSITAT ID VALÈNCIA
EL RÈCTOR