

Investidura com a doctor honoris causa per la Universitat de Girona del Professor Evert Jan Baerends, professor emèrit de la Vrije Universiteit Amsterdam, Països Baixos

Laudatio

Introducció

Rector Magnífic de la Universitat de Girona;
presidenta del Consell Social de la Universitat de Girona;
secretari general;
excel·lentíssimes autoritats acadèmiques, polítiques i civils;
prof. Dr. Sovan Lek;
prof. Dr. Emili Garcia-Berthou;
membres de la comunitat universitària;
amigues i amics,

És per a mi un honor presentar avui, juntament amb el Prof. Marcel Swart, en aquesta solemne sessió d'investidura, els mèrits que reuneix el Prof. Evert Jan Baerends per ser investit doctor honoris causa de la nostra universitat.

Aquesta concessió, promoguda pel Departament de Química i amb l'adhesió de l'Institut de Química Computacional i Catàlisi, s'ha fet prenent en consideració els criteris que estableix la normativa de la nostra universitat i, molt especialment, els que es refereixen a les aportacions científiques i a la vinculació del nou doctor honoris causa amb la nostra universitat.

Per qüestions de salut, el Prof. Evert Jan Baerends no ens pot acompanyar avui en aquest acte. Des d'aquí li desitgem una ràpida i total recuperació. Amb el Prof. Marcel Swart hem preparat aquesta presentació dels mèrits del Prof. Evert Jan Baerends i hem decidit que un servidor llegirà aquesta *laudatio* i que el Prof. Marcel Swart llegirà el discurs d'acceptació que ha escrit el Prof. Evert Jan Baerends per a aquesta ocasió.

En la primera part de la presentació ens referirem a les principals aportacions científiques de l'homenatjat i ho farem en anglès per tal que el Prof. Evert Jan Baerends ens pugui seguir. En la segona part comentarem la vinculació del Prof. Evert Jan Baerends amb la Universitat de Girona, i en aquest moment tornarem al català.

Scientific merits

Summarizing the scientific career of Professor Baerends in few words is a very complex task, since his main contribution, beyond his tangible achievements, is his capacity to transmit to collaborators his enthusiasm for discovery and his continued commitment to rigor and truth. Evert Jan Baerends has dedicated his life to science and has spent his career acquiring scientific knowledge and disseminating it to new generations with a passion that is simply an extension of his passion for life in all its facets.

Evert Jan Baerends is professor emeritus of the Vrije Universiteit Amsterdam. He is currently one of the most prominent researchers in the field of theoretical and computational chemistry. He was born in 1945 in Voorst, Friesland, a region of the Netherlands with its own language, like Catalonia. He did his PhD at the Vrije Universiteit Amsterdam under the supervision of Prof. Pieter Ros. During that time, he had to deal with transition-metal complexes. He began to use traditional computational techniques to study these complexes with the Hartree-Fock method, but he soon realized that the results obtained were not reliable. At this time, crystals containing metals were typically studied by physicists using the X_α method, a method based on the density functional theory (DFT). Therefore, he decided to investigate whether methods based on the DFT were feasible in transition metal chemistry. It was a brave, somewhat quixotic quest (for a man who, incidentally, physically resembles the Quixote). No one had used the DFT method in chemistry before, so he had to program his own code to perform the simulations. He adopted pragmatic and efficient numerical approaches to generate his own Hartree-Fock-Slater (HFS) program, which later became the Amsterdam Molecule (AMOL) code currently used by many computational chemists as the Amsterdam Density Functional (ADF) program. The program stands out for its unique features such as Slater orbitals and the pioneering use of precise numerical integration, density fitting, linear scaling, and parallelization techniques. Since the 1970s, Prof. Baerends and his collaborators, with special mention of the late Prof. Tom Ziegler, have demonstrated the utility of DFT tools for computational chemistry studies. Twenty years after the first DFT calculations by Baerends, the 1992 release of the Gaussian program incorporated the DFT methods. As a result, DFT methods became highly popular in the theoretical and computational chemistry community. In 1998 the Nobel Prize in Chemistry was awarded to Walter Kohn “for his development of the density-functional theory” and to John A. Pople “for his development of computational methods in quantum chemistry.” Today DFT has become the computational quantum mechanical modelling method most used in physics, chemistry, and material science to investigate the electronic structure of atoms, molecules, and condensed phases. The DFT method reached this level of popularity thanks to the work of Prof. Baerends and collaborators who proved its utility. Many of us consider it unfair to have excluded Prof. Baerends from the list of awardees of the 1998 Nobel Prize in Chemistry.

Now I will briefly refer to other relevant works of Evert Jan Baerends. He complemented the aforementioned ADF program with the BAND DFT program, which extended the molecular treatment to periodic systems. Also in this field, Prof. Baerends has made significant contributions. He elucidated the connection between properties of the exchange-correlation

(xc) potential and that of the so-called exchange-correlation hole. In this way, he was able to improve the calculation of response properties and time-dependent DFT. He has also explored the relationship between the density matrix and the xc-hole. In later studies, he developed density matrix functionals, the basis of the density matrix functional theory, opening up a promising avenue to improve current DFT methods. He analyzed chemical bonding and chemical interactions, a central aspect of chemistry, using Morokuma's energy decomposition analysis as implemented in ADF, and mastered the treatment of relativistic effects on electronic structure. He developed the efficient and widely used zeroth-order regular approximation (ZORA), which is very well suited for application with density functional theory. Finally, the Baerends group also developed a multilevel approach entirely based on DFT. In particular, he used a frozen-density embedding (FDE) method to calculate properties, such as UV-Vis spectra, electron paramagnetic resonance hyperfine coupling constants, and circular dichroism spectra, of molecules in solvents.

He has made these important scientific contributions in more than 450 papers that have received more than 50000 citations. His h index is 98. Among his many other distinctions, let us mention the prestigious Schrödinger Medal of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), which he was awarded in 2010 for his pioneering contributions to the development of computational density functional methods and his fundamental contributions to density functional theory and density matrix theory.

Relacions amb la UdG

El Prof. Baerends ha col·laborat amb molts dels químics teòrics més prestigiosos del món. Però per a nosaltres és un orgull poder destacar que el Prof. Baerends ha inspirat la recerca i ha contribuït decisivament a la formació i consolidació de moltes persones que actualment formen part del Departament de Química i de l'Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC). La col·laboració que es va iniciar fa vint-i-cinc anys, quan vaig visitar el laboratori del Prof. Baerends, ha influït decisivament durant la dècada dels anys 90 en la formació predoctoral i postdoctoral de diversos membres de l'IQCC i ha seguit fins ara a través d'una col·laboració continuada entre els dos grups de recerca.

El Prof. Baerends ha donat sempre suport als químics teòrics gironins, implicant-se en la seva formació i participant de manera molt destacada en els Girona Seminars de 2008 i 2010, reunions biennals organitzades per l'Institut. Ha contribuït de manera decisiva a millorar la qualitat de la recerca de l'Institut de Química Computacional i Catàlisi, del Departament de Química i de la Facultat de Ciències.

De les visites de membres del grup de recerca del Prof. Baerends a Girona destaquem les que va fer en diverses ocasions el mateix Prof. Baerends, o les de F. Matthias Bickelhaupt (en in comptables ocasions), de Célia Fonseca Guerra, de Ruud Visser, i de Marcel Swart quan era *postdoc* en el grup del Prof. Baerends. Membres del nostre Institut han visitat el grup de recerca del Prof. Baerends en diverses ocasions, com per exemple Jordi Poater com a doctorand i *postdoc*, Pedro Salvador, Marcel Swart, Sergei Vyboishchikov, Sílvia Simon, Anna Dachs, David Hugas, Laia Guillaumes, Juan Pablo Martínez, Abril C. Castro i un servidor,

que vaig realitzar-hi una primera visita l'any 1994 que va marcar la meva carrera científica.

La relació del Prof. Baerends amb la Universitat de Girona ha estat llarga i intensa i ha donat com a fruit més de 60 publicacions conjuntes i múltiples presentacions a congressos, així com la signatura de diversos convenis. El primer d'aquests convenis va ser signat l'11 de gener de 2012 i regulava la col·laboració entre les dues Universitats en el camp de la Química Teòrica i Computacional. Dos doctors (Laia Guillaumes i Juan Pablo Martínez) ja han defensat la seva tesi cotutelada entre la Universitat de Girona i la Vrije Universiteit Amsterdam en base a aquest conveni.

El Prof. Baerends té una projecció molt important, doncs, de mestratge sobre diversos professors i investigadors del Departament de Química i de l'Institut de Química Computacional i Catàlisi. Val a dir que aquest mestratge s'ha estès a altres professors i investigadors d'altres universitats i centres de recerca catalans. Com a més destacades, podem mencionar les col·laboracions del Prof. Baerends amb els professors Vicenç Branchadell i Mariona Sodupe, de la Universitat Autònoma de Barcelona; amb el professor Josep Maria Poblet, de la Universitat Rovira i Virgili, i amb el professor Carles Bo, de l'Institut Català d'Investigacions Químiques.

Deixeu-me acabar amb un fragment del llibre *Ideas sobre la complejidad del mundo*, del professor Jorge Wagensberg, recentment traspasat, físic català i professor de teoria dels processos irreversibles a la Facultat de Física de la Universitat de Barcelona, expert en museologia i primer director del CosmoCaixa. Sobre la simulació científica, escriu Wagensberg: «El panorama de la investigación científica de vanguardia se ha visto conmocionado por los simuladores. Los científicos conocen bien el valor de un resultado experimental o de un resultado teórico, pero ¿cuál es el valor de un resultado simulado? Hay dos extremos que interesa comentar. El primero se refiere a aquellas teorías que tienen poca oportunidad de llegar a ser contrastadas con la realidad. Son los científicos ultrateóricos, tanto que a veces, y no sin ironía, se les conoce como los científicos-poeta. El drama aquí es una teoría sin experiencia. (...) La simulación ayuda a estos científicos-poeta porque ayuda a legitimar teorías. Ayuda menos que lo haría un experimento, de acuerdo, pero ayuda más que no tener nada. (...) En este caso, la simulación no es experiencia, pero hace de, la sustituye en relación con la teoría. El otro extremo se refiere a observaciones o experimentos que se nos antojan incomprensibles por incomprensibles, esto es, cuando no puede encontrarse ninguna teoría que sea más compacta que la propia observación. Para muchos científicos tales experimentos nada aportan en favor de la inteligibilidad de la realidad, no van más allá de la realidad, es decir, son sólo una buena cocina. Al científico-poeta se opone entonces, con similar problema, el científico-cocinero. El drama ahora es el de la experiencia sin teoría. La simulación también sirve de socorro en este extremo. Un experimento que converja con cierta simulación tiene más valor científico que un experimento que no converja con nada en absoluto. Aquí la simulación no es teoría, pero hace de, la sustituye en el sentido de que confiere una cierta inteligibilidad a cierta realidad. ¿En qué quedamos? ¿Es la simulación una especie de experiencia o una especie de teoría? (...) La simulación no es teoría ni experiencia, ni un mero útil de cálculo, sino una genuina forma de aproximación a la realidad que acaso esté revolucionando el mismísimo método científico.»

Com hem assenyalat en subratllar els mèrits científics del Prof. Baerends, aquest ha destacat tant en la vessant de químic-poeta, desenvolupant nova teoria no sempre confrontable amb resultats experimentals, i per tant necessitada de simulacions per ser legitimada, com en la vessant de químic-cuiner, portant a terme simulacions que han permès fer més comprensibles realitats químiques altament complexes. Però ha anat més enllà, i amb les seves simulacions ha aconseguit una comprensió profunda de l'enllaç químic. «Un cop s'entén l'univers a nivell atòmic, la resta és senzilla» va dir el Prof. Richard P. Feynman. Certament, les aportacions de Baerends ens han permès avançar en aquesta direcció i entendre millor el nostre univers als nivells atòmic i molecular.

El Prof. Baerends s'ha fet un lloc d'honor dins la potent escola holandesa de químics-físics, entre els quals hi ha figures com Johannes Diderik Henricus van der Waals (premi Nobel de Física 1910), Jacobus Henrikus van't Hoff (premi Nobel de Química 1901), Peter Joseph William Debye (Premi Nobel de Química 1936) o Paul Josef Crutzen (Premi Nobel de Química 1995). Isaac Newton va adaptar una frase atribuïda a Bernard de Chartres per dir: «He pogut veure més lluny que ningú perquè he pujat a les espatlles de gegants.» En el camp de la DFT, Baerends ha estat un d'aquests gegants que ha permès a molts químics teòrics i computacionals, entre ells molts membres de l'Institut de Química Computacional i Catalisi, veure-hi més lluny.

Baerends ha estat una font d'inspiració permanent per a molts doctorands i *postdocs* que ha dirigit amb rigor i passió. Amb el seu mestratge el Prof. Baerends ha contribuït decisivament a la formació d'investigadors que han fet aportacions molt rellevants en el camp de la química teòrica, ha establert una xarxa de col·laboracions internacionals sòlida, i el que també és molt important, ho ha fet gràcies al seu esperit crític, un entusiasme sense fi, una capacitat de treball molt elevada i una motivació per treballar en equip envejable. Tot plegat ha contribuït a fer avançar la frontera de la ciència i a aixecar el nivell de la química teòrica europea i mundial.

És, doncs, per moltes raons i, certament, per tot això, Rector Magnífic, que sol·licitem que s'atorgui i es confereixi el grau de doctor honoris causa al Prof. Evert Jan Baerends.

Dr. Miquel Solà Puig
Dr. Marcel Swart

Girona, 9 de maig de 2019