

Acto de Investidura
como Doctor Honoris Causa
del Señor
Don Enrico Clementi

ACTO DE INVESTIDURA
COMO DOCTOR HONORIS CAUSA
DEL SEÑOR
DON
ENRICO CLEMENTI

OVIEDO, 6 DE OCTUBRE DE 2017

- Traducción al italiano del Discurso del Rector: José García Fernández.
- Traducción al italiano de la Laudatio del Padrino: José García Fernández.
- Traducción al castellano del Discurso de D. Enrico Clementi: José García Fernández.
- Traducción del Protocolo del Acto: Enrique Mayor de la Iglesia.

D. Legal: AS 2751-2017

Imprime: Servicio de Publicaciones. Universidad de Oviedo.

Todos los derechos reservados.

Índice

Acuerdo del Consejo de Gobierno de la Universidad de Oviedo	7
Protocolo de investidura	9
Protocollo Dell'atto	15
Laudatio del Padrino de don Enrico Clementi Don José Ángel Sordo Gonzalo	21
Laudatio del Professore don Enrico Clementi Don José Ángel Sordo Gonzalo	29
Discurso de Don Enrico Clementi	37
Discurso de Don Enrico Clementi	49
Discurso del Rector Magnífico Don Santiago García Granda	61
Discurso del Magnifico Signor Rettore, don Santiago García Granda	65
Doctores y Doctoras Honoris Causa investidos por la Universidad de Oviedo (1960-2017)	69

Acuerdo del Consejo de Gobierno de la Universidad de Oviedo

El Consejo de Gobierno de la Universidad de Oviedo, en sesión ordinaria celebrada el día 15 de junio de 2017, acordó por unanimidad, a propuesta del Departamento de Química Física y Analítica, conceder el grado de Doctor "Honoris Causa" por esta Universidad, en consideración a los extraordinarios méritos que ha acumulado a lo largo de su carrera en el ámbito de la química computacional, al Sr. Don Enrico Clementi.

Eva María Cordero González
Secretaria General de la Universidad de Oviedo

PROTOCOLO DEL ACTO

*PROTOCOLO DE LA SESIÓN ACADÉMICA EXTRAORDINARIA
EN LA QUE SERÁ SOLEMNEMENTE INVESTIDO
CON LA DIGNIDAD DE DOCTOR "HONORIS CAUSA",
POR ESTA UNIVERSIDAD DE OVIEDO, EL
SEÑOR DON ENRICO CLEMENTI*

*PARANINFO DE LA UNIVERSIDAD DE OVIEDO
(C/ SAN FRANCISCO, 1)
6 DE OCTUBRE DE 2017*

1.

Al llegar a la Universidad el señor Don Enrico Clementi, saldrá a recibirlo el señor Rector Magnífico junto con el padrino de aquél, y ambos conducirán al Candidato al supremo grado de Doctor a la Sala de Profesores, para presentarlo a los claustales allí reunidos.

Los claustales se revisten con los ornamentos propios de su grado. El padrino ayuda al Candidato al grado de Doctor a revestirse con los ornamentos correspondientes.

Todos los claustales, en comitiva, se dirigen al Paraninfo.

El Candidato al supremo grado de Doctor permanece en la Sala de Profesores junto con su Padrino a la espera de ser llamado.

2.

Una vez que la comitiva haya entrado en el Paraninfo, todos se colocan de acuerdo con el protocolo establecido.

El coro canta el himno "Veni, Creator Spiritus".

Al lado izquierdo de la Mesa Presidencial se habrán colocado tres asientos; la señora Secretaria General ocupará el de la izquierda y el Candidato, el del centro, con su Padrino a la derecha.

3.

El señor Rector Magnífico dice entonces:

"SEÑORES CLAUSTRALES, SENTAOS Y CUBRÍOS. SE DECLARA ABIERTA LA SESIÓN. LA SEÑORA SECRETARIA GENERAL DE LA UNIVERSIDAD LEERÁ EN VOZ ALTA LOS ACUERDOS DEL CONSEJO DE GOBIERNO QUE DAN LUGAR A ESTA SESION".

4.

La Sra. Secretaria General da lectura a los acuerdos por los que se concede el título de Doctor "Honoris Causa" al señor Don Enrico Clementi.

5.

El señor Rector Magnífico dice entonces:

"LA SEÑORA DECANA DE LA FACULTAD DE QUÍMICA SE DIGNARÁ CONDUCIR Y ACOMPAÑAR A LA PRESENCIA DE TODOS LOS CLAUSTRALES AQUÍ REUNIDOS AL CANDIDATO AL GRADO DE DOCTOR, SEÑOR DON ENRICO CLEMENTI.

6.

El Coro de la Universidad interpreta varios motetes.

7.

La Señora Decana, precedida de los maceros, sale de la reunión.

Al volver, vendrán en el siguiente orden: irán delante el maestro de ceremonias y los maceros, luego el padrino, llevando a su derecha al Candidato al grado de Doctor, y cerrará la marcha la Decana. Al entrar ellos, se pondrán en pie todos los claustrales.

El cortejo saludará a la Presidencia con una inclinación de cabeza. El Doctorando y su Padrino ocuparán los sitios dispuestos de antemano, mientras la señora Decana vuelve a su lugar.

8.

El señor Rector Magnífico dice entonces:

"EL PADRINO DE DON ENRICO CLEMENTI, DON JOSÉ ÁNGEL SORDO GONZALO, TIENE LA PALABRA".

9.

El padrino pronuncia el elogio del Doctorando, concluyendo con estas palabras:

"ASÍ PUES, CONSIDERADOS Y EXPUESTOS TODOS ESTOS HECHOS, DIGNÍSIMAS AUTORIDADES Y CLAUSTRALES, SOLICITO CON TODA CONSIDERACION Y ENCARECIDAMENTE RUEGO QUE SE OTORGUE Y CONFIERA AL SEÑOR DON ENRICO CLE-

MENTI EL SUPREMO GRADO DE DOCTOR "HONORIS CAUSA" POR LA UNIVERSIDAD DE OVIEDO".

10.

Se levantan todos; luego, el señor Rector Magnífico dice:

"AHORA VOY A PROCEDER A LA SOLEMNE COLACIÓN DEL GRADO DE DOCTOR "HONORIS CAUSA" AL SEÑOR DON ENRICO CLEMENTI".

Entonces, dirigiéndose al Doctorando y a su Padrino, dice:

"ACERCAOS. HABÉIS SIDO NOMBRADO DOCTOR "HONORIS CAUSA" POR EL CONSEJO DE GOBIERNO DE LA UNIVERSIDAD DE OVIEDO, EN TESTIMONIO DE VUESTROS RELEVANTES MERITOS. POR ELLO, Y EN VIRTUD DE LA AUTORIDAD QUE OSTENTAMOS, OS ENTREGAMOS Y CONFERIMOS EL TITULO QUE ATES- TIGÜE EN TODAS PARTES Y PARA SIEMPRE EL GRADO DE ESA DIGNIDAD DOCTORAL; Y COMO SÍMBOLO DE TAN ALTO HONOR, OS IMPONEMOS ESTE BIRRETE, TANTAS VECES LAUREADO, HONRADO SIN CESAR POR TAN GRANDES, TAN ILUSTRES Y TAN EXCELSOS MAESTROS EN LOS REINOS DE ESPAÑA. SOBRE VUESTAS CA-

BEZAS, CUAL CORONA DE VUESTROS ESTUDIOS Y MERITOS (se lo impone), OSTENTADLO SIEMPRE Y LLEVADLO A TODAS PARTES".

11.

El Sr. Rector Magnífico prosigue:

"VUESTRO PADRINO OS VA A ENTREGAR LOS ATRIBUTOS DE ESTE NOMBRAMIENTO Y DISTINCION; A SABER, EL LIBRO DE LA CIENCIA Y LA SABIDURIA, QUE ES PRECISO QUE CULTIVEIS Y DIFUNDAIS SIN DESCANSO, PARA QUE TENGAIS PRESENTE QUE, POR GRANDES QUE SEAN VUESTROS TALENTOS, SIEMPRE DEBEREIS MANIFESTAR REVERENCIA, RESPETO Y TODA CONSIDERACION A VUESTROS MAESTROS, QUE HAN SIDO VUESTROS PREDECESORES.

RECIBID EL ANILLO QUE EN LOS PASADOS TIEMPOS, EN ESTAS VENERABLES Y SOLEMNES CEREMONIAS, CUAL SIMBOLO DE LOS PRIVILEGIOS DE FIRMAR Y SELLAR TODOS LOS DICTAMENES, ARBITRAJES Y CONSULTAS DE VUESTRA CIENCIA Y PROFESION SE ENTREGABA Y POR CONFERIDO SE TENIA.

RECIBID, EN FIN, LOS GUANTES BLANCOS, COMO SIMBOLO DE LA FORTALEZA QUE VUESTRAS MANOS HAN DE CON-

SERVAR, Y TAMBIEN COMO SIGNO DE VUESTRA ALTISIMA DIGNIDAD".

12.

Una vez que el nuevo Doctor haya vuelto a su sitio, se sientan todos y el Sr. Rector Magnífico añadirá: "UNA VEZ CONFERIDO EL GRADO DE DOCTOR, SE CONCEDE LA PALABRA AL SR. D. ENRICO CLEMENTI, PARA QUE PRONUNCIE SU DISCURSO DE INGRESO EN ESTE CLAUSTRO".

13.

Concluido el discurso, el Sr. Rector Magnífico añadirá:

"ACERCAOS PARA PRESTAR CON LA MAS PLENA CONCIENCIA EL JURAMENTO QUE YO OS VOY A TOMAR EN NOMBRE Y POR LA AUTORIDAD DE ESTA UNIVERSIDAD DE OVIEDO".

Se acercan a la Mesa Presidencial el nuevo Doctor con su Padrino.

Se levantan todos; luego, el Sr. Rector Magnífico dice:

"¿JURAIS SOLEMNEMENTE POR VUESTRA CONCIENCIA Y HONOR DEFENDER Y RESPETAR TODOS LOS DERECHOS, PRIVILE-

GIOS Y HONORES DE ESTA UNIVERSIDAD DE OVIEDO, EN CUALQUIER PARTE DEL MUNDO EN QUE OS HALLAREIS, ASI COMO FAVORECERLA Y AYUDARLA CUANTAS VECES SE OS LO DEMANDARE?".

El nuevo Doctor "Honoris Causa" responderá:

"ASI LO JURO, ASI LO PROMETO, ASI LO ASEGURO, ASI LO QUIERO".

El Sr. Rector Magnífico dice entonces:

"SI ASI LO HICIEREIS, QUE LA MEMORIA DE TODOS LOS CLAUSTRALES OS LO PAGUE; Y SI NO, QUE OS LO DEMANDE".

El padrino se retira a su lugar.

14.

El Sr. Rector Magnífico obsequia al que ha recibido el grado de Doctor con la medalla de la Universidad de Oviedo, diciéndole:

"DIGNISIMO SEÑOR, OS ADMITO E INCORPORO AL CLAUSTRO DE ESTA UNIVERSIDAD DE OVIEDO, CON TODOS LOS DERECHOS, INMUNIDADES Y PRIVILEGIOS INHERENTES A LOS DEMAS DOCTORES; Y EN SEÑAL DE LA PAZ, BENEVOLENCIA Y AMISTAD CON QUE SIEMPRE HABIIS DE EJERCER VUESTRO MINISTERIO,

OS ABRAZO CON LA MAYOR CORDIALIDAD EN NOMBRE DE TODOS LOS DOCTORES DE ESTE CLAUSTRO AQUI PRESENTES".

Finalizado el abrazo, añadirá:

"QUE EL NUEVO DOCTOR QUE HA SIDO PROCLAMADO OCUPE EL ASIENTO A EL ASIGNADO".

(Se sientan todos)

15.

El Sr. Rector Magnífico pronunciará a continuación el discurso de bienvenida al nuevo Doctor.

16.

Concluido el discurso de bienvenida, el Coro canta el tradicional "Gaudeamus igitur".

17.

El Sr. Rector Magnífico pone término a la ceremonia diciendo:

"SE LEVANTA LA SESION".

18.

Salen todos del Paraninfo, siguiendo el mismo orden protocolario de grados y Facultades.

PROTOCOLLO DELL'ATTO

*PROTOCOLLO DELLA SESSIONE ACCADEMICA STRAORDINARIA
DURANTE LA QUALE SARÀ INVESTITO SOLENNEMENTE,
CON IL TITOLO DI DOTTORE "HONORIS CAUSA",
DA PARTE DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO
IL SIG. DON ENRICO CLEMENTI*

*AULA MAGNA DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO
(VIA SAN FRANCISCO, 1)
6 OTTOBRE 2017*

1.

Al suo arrivo presso l'Università, il Sig. Don Enrico Clementi sarà ricevuto dal Sig. Magnifico Rettore e dal suo padrino, entrambi condurranno il Candidato al massimo riconoscimento di Dottore nella Sala dei Professori, dove verrà presentato ai senatori accademici lì riuniti.

I senatori accademici indosseranno gli abiti ufficiali corrispondenti ai propri gradi. Il padrino aiuterà il Candidato al grado di Dottore a indossare gli abiti ufficiali corrispondenti.

I senatori accademici, in corteo, si dirigeranno presso l'Aula Magna.

Il Candidato al grado massimo di Dottore rimarrà nella Sala dei Professori insieme al suo Padrino in attesa di essere chiamato.

2.

Dopo l'entrata del corteo in Aula Magna, tutti prenderanno posto secondo il protocollo stabilito.

Il coro intonerà l'inno "Veni, Creator Spiritus".

Alla sinistra del Tavolo Presidenziale saranno collocati tre posti a sedere: la Segretaria Generale occuperà il posto a sinistra, il Candidato occuperà il posto centrale e il padrino occuperà il posto alla sua destra.

3.

Quindi, il Sig. Magnifico Rettore annuncerà:

"SIGNORI SENATORI ACCADEMICI, PRENDETE POSTO E COPRITEVI IL CAPO. DICHIARO APERTA LA SESSIONE. LA SIGNORA SEGRETARIA GENERALE DELL'UNIVERSITÀ LEGGERÀ AD ALTA VOCE LE MOTIVAZIONI ESPRESSE DAL CONSIGLIO DI GOVERNO PER LE QUALI SI DÀ LUOGO A QUESTA SESSIONE".

4.

La Sig.ra Segretaria Generale darà lettura degli accordi secondo i quali viene conferito il titolo di Dottore "Honoris Causa" al Sig. Don Enrico Clementi.

5.

Quindi, il Sig. Magnifico Rettore annuncerà:

"LA SIGNORA PRESIDE DELLA FACOLTÀ DI CHIMICA CONDURRÀ E ACCOMPAGNERÀ, ALLA PRESENZA DEI SENATORI ACCADEMICI QUI RIUNITI, IL CANDIDATO AL GRADO DI DOTTORE, IL SIG. DON ENRICO CLEMENTI".

6.

Il Coro dell'Università interpreterà varie composizioni.

7.

La Sig.ra Preside, preceduta dai mazzieri, uscirà dalla riunione.

Al loro ritorno, entreranno secondo il seguente ordine: per primo il maestro di cerimonie e i mazzieri, seguiti dal Padrino con il Candidato al grado di Dottore alla sua destra, chiuderà il corteo la Preside. Al loro ingresso, il senato accademico si alzerà in piedi.

Il corteo saluterà la Presidenza inclinando il capo. Il Dottorando e il suo Padrino occuperanno i posti a sedere prestabiliti, mentre la Sig.ra Preside tornerà al suo posto.

8.

Quindi, il Sig. Magnifico Rettore annuncerà:

"PRENDE LA PAROLA IL PADRINO DI DON ENRICO CLEMENTI, DON JOSÉ ÁNGEL SORDO GONZALO".

9.

Il Padrino pronuncerà l'elogio del Dottorando, e concluderà con le seguenti parole:

"PERCIÒ, ONOREVOLI AUTORITÀ E SENATORI, CONSIDERATI ED ESPOSTI I FATTI, CON TUTTO IL RISPETTO CHIEDO E

PREGO VIVAMENTE CHE SIA CONCESSO E CONFERITO AL SIG. DON ENRICO CLEMENTI IL GRADO DI DOTTORE "HONORIS CAUSA" DA PARTE DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO".

10.

Si alzeranno tutti in piedi; quindi, il Sig. Magnifico Rettore annuncerà:

"ADESSO PROCEDERÒ CON LA SOLENNE CERIMONIA DI CONFERIMENTO DEL GRADO DI DOTTORE "HONORIS CAUSA" AL SIG. DON ENRICO CLEMENTI".

Quindi, rivolgendosi al Dottorando e al suo Padrino, annuncerà:

"AVVICINATEVI. SIETE STATO NOMINATO DOTTORE "HONORIS CAUSA" DA PARTE DEL CONSIGLIO DI GOVERNO DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO, A TESTIMONIANZA DEI VOSTRI IMPORTANTI MERITI. PER QUESTA RAGIONE, E IN VIRTÙ DELLE AUTORITÀ A NOI CONFERITE, VI CONSEGNAMO E CONCEDIAMO IL TITOLO CHE TESTIMONI OVUNQUE E PER SEMPRE IL GRADO DI DIGNITÀ DI DOTTORE; INOLTRE, COME SIMBOLO DI ALTO ONORE, VI DIAMO QUESTO TOCCO, PREMIATO E ONORATO VARIE VOLTE DAI PIÙ GRANDI, ILLUSTRATI ED ECCELSI MAESTRI NEI

REGNI DI SPAGNA. SUI VOSTRI CAPI, A CORONARE I VOSTRI STUDI E MERITI (mette il tocco) OSTENTATELO SEMPRE E PORTATELO OVUNQUE".

11.

Il Sig. Magnifico Rettore continuerà:

"IL VOSTRO PADRINO VI CONSEGNERÀ GLI EMBLEMI DI QUESTA NOMINA E RICONOSCIMENTO; OVVERO, IL LIBRO DELLA SCIENZA E DELLA SAGGEZZA, CHE DOVRETE COLTIVARE E DIFFONDERE SENZA SOSTA, AFFINCHÉ POSSIATE RICORDARE CHE, PER QUANTO GRANDI SIANO I VOSTRI TALENTI, DOVRETE SEMPRE MANIFESTARE RIVERENZA, RISPETTO E RIGUARDO PER I VOSTRI MAESTRI, I QUALI SONO STATI I VOSTRI PREDECESSORI.

RICEVETE L'ANELLO CHE NEL PASSATO, DURANTE QUESTE VENERABILI E SOLENNI CERIMONIE, QUALE SIMBOLO DEI PRIVILEGI DI FIRMARE E SIGILLARE TUTTI I DECRETI, GLI ARBITRAGGI E LE CONSULTAZIONI DELLA VOSTRA SCIENZA E PROFESSIONE, VENIVA CONSEGNATO UNA VOLTA E PER SEMPRE.

RICEVETE, INFINE, I GUANTI BIANCHI, COME SIMBOLO DELLA FORZA CHE LE VOSTRE MANI DOVRANNO PRESERVARE,

OLTRE CHE COME SIMBOLO DELLA VOSTRA ALTISSIMA DIGNITÀ".

12.

Dopo che il nuovo Dottore avrà fatto ritorno al proprio posto, il Sig. Magnifico Rettore aggiungerà:

"DOPO AVER CONFERITO IL GRADO DI DOTTORE, CEDO LA PAROLA AL SIG. DON ENRICO CLEMENTI, AFFINCHÈ PRONUNCI IL SUO DISCORSO D'INGRESSO NEL SENATO ACCADEMICO".

13.

Concluso il discorso, il Sig. Magnifico Rettore aggiungerà:

"AVVICINATEVI AFFINCHÈ CON LA MASSIMA COSCIENZA POSSIATE PRESTARE IL GIURAMENTO CHE A NOME E PER L'AUTORITÀ DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO IO VI FARÒ PRENDERE".

Il nuovo Dottore si avvicinerà alla Tavola Presidenziale accompagnato dal suo Padrino.

Si alzeranno tutti in piedi; dopodiché il Sig. Magnifico Rettore annuncerà:

"GIURATE SOLENNEMENTE SULLA VOSTRA COSCIENZA E ONORE DI DIFENDERE E RISPETTARE I DIRITTI, I PRIVILEGI E

GLI ONORI DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO, IN QUALUNQUE PARTE DEL MONDO VOI VI TROVIATE, COSÌ COME DI FAVORIRLA E AIUTARLA OGNI VOLTA CHE VI VERRÀ CHIESTO?":

Il nuovo Dottore "Honoris Causa" risponderà:

"LO GIURO, LO PROMETTO, LO GARANTISCO, LO VOGLIO".

Quindi, il Sig. Magnifico Rettore annuncerà:

"SE OTTEMPERETE AL VOSTRO DOVERE, CHE IL SENATO ACCADEMICO VE NE RENDA MERITO; SE COSÌ NON FOSSE, CHE VE NE CHIEDA CONTO".

Il Padrino tornerà al proprio posto.

14.

Il Sig. Magnifico Rettore renderà omaggio a colui che ha ricevuto il grado di Dottore con la medaglia dell'Università di Oviedo, e rivolgendosi ad egli dirà:

"ONOREVOLE SIGNORE, VI AMMETTO E VI INCORPORO AL SENATO ACCADEMICO DELL'UNIVERSITÀ DI OVIEDO, CON TUTTI I DIRITTI, LE IMMUNITÀ E I PRIVILEGI INERENTI AI DOTTORI; INOLTRE, COME SIMBOLO DELLA PACE, BENEVOLENZA E AMICIZIA CON LE QUALI AVETE

SEMPRE ESERCITATO IL VOSTRO MINISTERO, VI ABBRACCIO CON LA PIÙ GRANDE CORDIALITÀ A NOME DI TUTTI I DOTTORI DEL SENATO ACCADEMICO QUI PRESENTI".

Concluso l'abbraccio, aggiungerà:

"IL NUOVO DOTTORE APPENA PROCLAMATO OCCUPI IL POSTO A LUI ASSEGNATO".

(Tutti si siederanno)

15.

Il Sig. Magnifico Rettore pronuncerà il discorso di benvenuto al nuovo Dottore.

16.

Concluso il discorso di benvenuto, il Coro intonerà il tradizionale "Gaudeamus igitur".

17.

Il Sig. Magnifico Rettore porrà fine alla cerimonia dicendo:

"LA SEDUTA È TOLTA".

18.

Usciranno tutti dall'Aula Magna, seguendo lo stesso ordine di protocollo di gradi e Facoltà.

Discurso del Padrino de Don Enrico Clementi

Don José Ángel Sordo Gonzalo



José Ángel Sordo Gonzalo

Excelentísimo Señor Rector Magnífico,
Autoridades Académicas,
Colegas,
Estudiantes,
Señoras y Señores:

El departamento de Química Física y Analítica, bajo la dirección de la profesora Rosana Badía Laiño, propuso en su reunión de 22 de marzo de 2017 la nominación del profesor Enrico Clementi como Doctor “honoris causa”. El Consejo de Gobierno de la Universidad de Oviedo aprobó el nombramiento, en sesión celebrada el 15 de junio de 2017, bajo la presidencia del profesor Santiago García Granda, nuestro Rector.

Representa un alto honor para mí pronunciar la presente *Laudatio*, con el fin de mostrarles los múltiples méritos que el profesor Clementi atesora, convirtiéndole en un candidato idóneo a tan alta distinción, concedida por nuestra Universidad a partir de 1960 a un reducido grupo de eminentes personalidades en los campos de las Ciencias y las Humanidades.

Profesor Enrico Clementi:

Usted ha realizado contribuciones fundamentales a la ciencia que yo voy a tratar de resumir con la brevedad que exige el presente Acto y con el fin de mostrar a la audiencia presente en esta Aula Magna algunos de los aspectos más relevantes en su brillante trayectoria científica.

Señoras y Señores:

A comienzos del siglo XIX, Augusto Comte, abanderado del positivismo, había pronosticado que “*Todo intento de emplear métodos matemáticos en el estudio de los problemas químicos debe ser considerado profundamente irracional y contrario al espíritu de la química...*”. “*Si el análisis matemático, continuaba Comte, ocupara alguna vez un lugar prominente en la Química —una observación que resulta felizmente casi imposible— ocasionaría una rápida y amplia degeneración de esa ciencia*”.

Como contraposición, el gran químico francés Joseph Louis Gay-Lussac había predicho unas décadas antes que “*Quizás no estemos muy lejos del día en el que seremos capaces de someter todo el conjunto de fenómenos químicos al cálculo*”.

El desarrollo de la Química Computacional, al que el profesor Enrico Clementi, hoy entre nosotros, ha contribuido decisivamente, supone una evidencia empírica irrefutable a favor de la predicción del científico y en detrimento del pensador.

Si tuviéramos que aventurarnos a establecer un punto de partida para la nueva disciplina, quizás no erraríamos demasiado al delimitarla a finales de los años 20 del siglo pasado, cuando el genial físico británico Paul A.M. Dirac, epónimo de la medalla que fue concedida en 1987 al profesor Clementi, sentenció que “*Las leyes físicas básicas necesarias para el establecimiento de la teoría matemática de una parte de la Física y de toda la Química, son completamente conocidas, radicando la única dificultad en el hecho*

de que la aplicación exacta de estas leyes da lugar a ecuaciones demasiado complicadas para ser resueltas”.

El impresionante desarrollo tecnológico asociado a la II Guerra Mundial proporcionó la herramienta que coadyuvaría de forma definitiva a superar las dificultades mencionadas por Dirac. Tal herramienta fue el computador. Las potencias aliadas invirtieron sabiamente una cantidad ingente de medios con el fin de desarrollar los primeros computadores digitales: COLOSSUS en Bletchley Park (Reino Unido), ENIAC en Arlington Hall (Estados Unidos) y MANIAC en Los Alamos (Estados Unidos), diseñados por brillantes matemáticos como Alan Turing y John von Neumann. La computación intensiva llevada a cabo en tiempos de guerra, justificó con creces la inversión realizada, permitiendo el desciframiento de los códigos ENIGMA y PURPLE y facilitando los cálculos necesarios para poner a punto las terribles y definitivas armas nucleares, desarrolladas dentro del proyecto Manhattan.

Después de la guerra, los científicos destinaron cada vez más y más tiempo de cálculo a las aplicaciones académicas en las diversas disciplinas, siendo la Química una de las beneficiadas con el uso de la nueva herramienta.

El profesor Clementi comienza su carrera científica allá por 1954 defendiendo una tesis doctoral en espectroscopía en el departamento de Física de la Universidad de Pavía. Fue, según él mismo ha escrito, una conferencia del profesor C. Coulson, uno de los precursores en el empleo de la Mecánica

Cuántica en el estudio del enlace químico, la que determinó su vocación científica. Realizó diversas estancias posdoctorales durante el periodo 1955-1961 en centros de gran prestigio internacional. Así, en el laboratorio del Premio Nobel Giulio Natta, el profesor Clementi analizó, desde la perspectiva mecánico-cuántica, la conductividad eléctrica de los polímeros orgánicos. Trabajó también en Berkeley con el prestigioso químico-físico Kenneth S. Pitzer en el estudio de la estabilidad de pequeños *clusters* de carbono, prediciendo por primera vez la existencia de moléculas de carbono C_n , tanto lineales como en forma de anillo. En las propias palabras del profesor Pitzer, “*Si hubiéramos ido lo suficientemente lejos en esta investigación, habríamos sido capaces de predecir el fullereno C_{60}* ”, por cuya detección experimental, casi 40 años después, Harold W. Kroto, Robert F. Curl y Richard E. Smalley recibieron el Premio Nobel. Pero las limitaciones en la capacidad computacional de la época lo impidieron. En 1960, colabora con el profesor Robert S. Mulliken (Premio Nobel en 1966) en el famoso *Laboratory of Molecular Structure and Spectra*, del departamento de Física de la Universidad de Chicago, contribuyendo de manera muy activa en la aplicación de la Teoría de Orbitales Moleculares —en cuyo marco se ha venido desarrollando, fundamentalmente, la Química Teórica hasta nuestros días— al estudio de diversos sistemas de interés químico. El profesor Clementi describe su estancia en dicho laboratorio de la forma siguiente: “*La atmósfera en el*

laboratorio de Mulliken era verdaderamente excitante ya que éramos conscientes de ser miembros de un laboratorio excepcional reconocido mundialmente. Nos sentíamos parte del mejor laboratorio en el mundo". Mi también maestro durante la estancia que realicé en los años 80 del siglo pasado en la Universidad de Alberta (Canada), el profesor Serafín Fraga, que desgraciadamente ya no se encuentra entre nosotros, miembro igualmente del grupo de Mulliken, lo describe en forma muy similar: "*Pasé tres años inolvidables en el laboratorio de Mulliken en Chicago, escribe el profesor Fraga, tres años de trabajo intenso, sabiendo que estábamos abriendo un nuevo camino, usando por primera vez ordenadores para el estudio de la estructura molecular*". En 1967, el profesor Clementi volvería a realizar una nueva estancia de un año en este laboratorio, culminando un estudio sobre la reacción entre el amoníaco (NH_3) y el ácido clorhídrico (HCl) que ha supuesto un hito histórico en la Química Computacional ya que marcó el inicio de lo que ha venido a conocerse como la "Aproximación Supermolecular", una metodología de uso regular en nuestros días. El profesor Clementi ha resaltado la intensidad del momento: "*Construir la superficie de potencial de la reacción $\text{NH}_3 + \text{HCl}$, escribe, fue emocionante. Cada sábado y domingo trabajando infatigablemente en la sala de computadores*". La comunidad científica recibió los resultados con gran júbilo y tanto el diario *The New York Times* como la revista *Time* se hicieron eco de la investigación, recogida en tres publicaciones

científicas, con el profesor Clementi como único firmante, que ocupan un lugar estelar en la historia de la Química Computacional. Efectivamente, el profesor Mulliken, en la ceremonia de recepción de su Premio Nobel, en diciembre de 1966, se refiere hasta en nueve ocasiones a las investigaciones en curso del profesor Clementi que culminarían en las mencionadas publicaciones. Es difícil encontrar en los archivos de la Fundación Nobel un discurso en el que un premiado haga tan reiterada referencia a las investigaciones de otro colega. El profesor Clementi tenía por entonces 35 años y los investigadores más sobresalientes del momento estaban muy pendientes de sus pasos.

Pero volvamos a 1961. Habiendo recibido numerosas ofertas para trabajar en las más prestigiosas instituciones, siendo particularmente destacable la realizada por el Premio Nobel Gerhard Herzberg desde el *National Research Council of Canada*, el profesor Clementi decide aceptar finalmente, por consejo del profesor Mulliken, una oferta de *International Business Machines Corporation* (IBM) en San Jose, California, pues ello le permitiría disponer de la potencia computacional requerida para desarrollar sus múltiples proyectos de investigación. Durante el periodo 1963-1965, publicó un conjunto de artículos, la mayor parte como único firmante, que constituyeron un nuevo hito en la Química Computacional. En ellos se tabularon funciones de onda atómicas, solución de la ecuación de Schrödinger, para una buena parte de los elemen-

tos de la Tabla Periódica. En relación con el impacto de esta investigación, a título ilustrativo, destacaremos que una de dichas publicaciones ha sido citada unas 2.500 veces según la *Web of Science*. Años después, en 1974, se publicó una recopilación de dichas funciones de onda que ha recibido casi 2.000 citas. Una obra ciclópea, propia de una persona de enorme talento y con una capacidad de trabajo excepcional. Se trata indudablemente de contribuciones científicas de extraordinaria relevancia, reservadas a unos pocos.

Volviendo a 1965, el profesor Clementi puso en marcha por entonces un programa posdoctoral, *The IBM Visiting Scientist Program*, que abrió las puertas de la Química Computacional a numerosos científicos e ingenieros de todas las partes del mundo. IBM pagaba muy bien y te daba la oportunidad de trabajar en un laboratorio de prestigio internacional, bajo el liderazgo de uno de los científicos más reputados de la época. ¡Todos los jóvenes científicos en periodo posdoctoral soñábamos con lograr un destino como aquél! Algunos de ellos nos encontramos hoy aquí rindiendo homenaje a nuestro maestro; la persona que nos proporcionó la oportunidad de adquirir una formación científica inmejorable. Gracias Enrico, en nombre de todos los que en su día nos beneficiamos de ese programa.

Como colofón a ese feraz periodo productivo, el profesor Clementi es nombrado *IBM Fellow* en 1969, el mayor honor otorgado por la compañía a un científico o ingeniero de su plantilla. Baste men-

cionar al respecto que, hasta el momento, 5 han sido los Premios Nobel que forman parte de ese colectivo elitista. Un *IBM Fellow* puede desarrollar cualquier proyecto de su interés, en cualquiera de las sedes de IBM a lo largo y ancho del mundo, recibiendo una financiación suficiente. Representa pues la panacea para cualquier investigador. El profesor Clementi no desaprovecharía la oportunidad que IBM le brindaba.

En 1974, el profesor Clementi publica, en colaboración con O. Matsuoka y M. Yoshimine, el mejor potencial que nunca haya sido construido para representar el agua en estado líquido. Generado totalmente a partir de cálculos *ab initio*, es decir, sin inclusión de parámetros empíricos, ha recibido más de 1.200 citas en la literatura científica.

Razones personales, sin embargo, obligaron al profesor Clementi a abrir un paréntesis de 5 años, trasladándose a Italia, donde creó y dirigió un departamento de computación en la empresa Montedison y ganó, con el número uno, un concurso-oposición para catedráticos de universidad.

Se le atribuye a Sir Hamphry Davy, el que fuera fundador de la electroquímica y Presidente de la *Royal Society* londinense, la anécdota de vanagloriarse de que su mayor contribución a la ciencia hubiera sido el descubrimiento del gran Faraday. El profesor Clementi descubrió durante este paréntesis europeo a la profesora Giorgina Corongiu quien ha sido su más cercana y eficiente colaboradora en la nueva etapa que se abriría con la reincorporación

del profesor Clementi a IBM, después de renunciar a sendas cátedras en Roma y Pisa, fundando el *Scientific and Engineering Computations Center*, primero en Poughkeepsie y más tarde en Kingston, ambas ciudades en el estado de New York, donde se desarrollaron investigaciones punteras durante el periodo 1979-1991 en el campo de las Simulaciones Moleculares de sistemas de interés biológico.

Muchas han sido las aportaciones fundamentales llevadas a cabo en dicho periodo por el laboratorio del profesor Clementi. Con el fin de no alargar mi intervención más de lo razonable, voy a destacar brevemente solo dos de ellas.

En 1983, el profesor Clementi y su grupo comienzan a diseñar y poner a punto un nuevo sistema operativo (*software* y *hardware*) bautizado con el nombre de *Loosely Coupled Array of Processors*, que permitía paralelizar los códigos de las distintas aplicaciones científicas, compitiendo ventajosamente con el por entonces estándar de paralelización: los supercomputadores CRAY. El modelo se empleó exitosamente en distintas instituciones norteamericanas y llegó a ser exportado a la extinta Unión Soviética.

Por otra parte, a mediados de los años 80 del siglo pasado, el profesor Clementi introdujo el concepto de Simulación Global, que ha constituido un modelo de desarrollo en el cuerpo de la Química Computacional. La Simulación Global permite, por ejemplo, mediante una cadena de códigos, partiendo de la resolución de la ecuación de Schrödin-

ger para una molécula de agua (mundo microscópico), alcanzar la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes (mundo macroscópico). De esta manera, a partir de la función de onda de la molécula de agua, se puede predecir el movimiento de las mareas observado experimentalmente. Así se hizo con notable éxito en el caso de la *Buzzards Bay*, en *Cape Code, Massachussets*. Todo ello a partir de cálculos *ab initio* que no incorporan parámetros empíricos: ¡Toda una proeza teórica!

En 1993, el profesor Clementi fue nombrado *Full Professor (Exceptional Class)* en Química Teórica en la Universidad Louis Pasteur de Estrasburgo, a propuesta del Premio Nobel Jean-Marie Lehn. Allí permaneció en activo hasta el año 2000.

Actualmente, el profesor Clementi continúa enriqueciéndonos con sus publicaciones. En un reciente artículo, en el que aborda la evolución de los computadores y las simulaciones, sugiere extender la interdisciplinaridad —distintivo específico del químico computacional—, de tal forma que incluya la colaboración con expertos en Humanidades. Ello supondrá, según el profesor Clementi, una evolución desde el *Homo Sapiens* hacia el que él denomina *Homo Novus*, nombre con el que los antiguos romanos premiaban a aquellos plebeyos que lograban incorporarse a la clase aristocrática. Una alusión a la evolución experimentada por el químico computacional cuando su campo de interés se expande desde la Química hacia la Biología.

El tiempo apremia y yo no quiero abrumarles con

los numerosos premios, distinciones y honores a los que se ha hecho acreedor el profesor Clementi. Permítanme tan solo, para finalizar, entresacar de su descollante *curriculum vitae* dos datos rotundamente esclarecedores. Por una parte, que ha publicado medio millar de artículos que han recibido más de 20.000 citas en la literatura científica. En segundo lugar, que posee un *índice h 75* —es decir, 75 artículos del profesor Clementi, una buena parte de los mismos como único firmante, han sido citados al menos en 75 ocasiones—, habiendo sido uno de los 300 científicos más citados en todas las áreas del

conocimiento durante el periodo 1965-1978, según la revista bibliométrica *Current Contents*.

Así pues, considerados y expuestos todos estos méritos, dignísimas autoridades y claustrales, solicito con toda consideración y encarecidamente ruego que se otorgue y confiera al profesor Enrico Clementi el supremo grado de Doctor “honoris causa” por la Universidad de Oviedo.

Muchas gracias.

Laudatio del Professore Don Enrico Clementi

Don José Ángel Sordo Gonzalo

Eccellentissimo e Magnifico Signor Rettore,
Autorità Accademiche,
Collegli,
Studenti,
Signore e Signori,

Il Dipartimento di Chimica Fisica e Analitica, sotto la direzione della Professoressa Rosana Badía Laíño, propose nella sua riunione del 22 marzo 2017 la nomina del Professore Enrico Clementi come Dottore *honoris causa*. Il Consiglio direttivo dell'Università di Oviedo approvò questa designazione durante una sessione tenutasi il 15 giugno 2017 sotto la presidenza del Professore Santiago García Granda, il nostro Rettore.

È un grande onore per me pronunciare questa laudazione al fine di mostrargli i molteplici meriti conseguiti dal Professore Clementi, facendolo un candidato idoneo per una così alta distinzione, concessa dalla nostra Università a partire dal 1960 ad un ristretto gruppo di personaggi eminenti nel campo della Scienza e delle Discipline Umanistiche.

Professore Enrico Clementi,

Lei ha dato un decisivo contributo alla scienza che io cercherò di riassumere con la brevità richiesta da questo atto e con il proposito di mostrare al pubblico presente in quest'Aula Magna alcuni degli aspetti più rilevanti della Sua brillante carriera scientifica.

Signore e Signori,

All'inizio dell'Ottocento, Auguste Comte, portabandiera del Positivismo, aveva previsto che «qualsiasi tentativo di impiegare metodi matematici nello studio dei problemi chimici deve essere considerato profondamente irrazionale e opposto allo spirito della Chimica...». «Se l'analisi matematica», proseguiva Comte, «un giorno occupasse un posto prominente nella Chimica — un'osservazione fortunatamente quasi impossibile —, essa causerebbe una rapida ed estesa degenerazione di quella scienza».

Al contrario, il grande chimico francese Joseph Louis Gay-Lussac aveva predetto qualche decennio prima che «forse non siamo molto lontani dal giorno in cui saremo in grado di sottoporre tutto l'insieme dei fenomeni chimici al calcolo».

Lo sviluppo della Chimica computazionale, al quale il Professore Enrico Clementi, qui con noi oggi, ha decisamente contribuito, è un'evidenza empirica irrefutabile a favore della previsione dello scienziato ed a scapito del pensatore.

Se dovessimo avventurarci a stabilire un punto di partenza per questa nuova disciplina, forse non ci sbagliremmo troppo inquadrandola alla fine degli anni '20 del secolo scorso, quando il brillante fisico britannico Paul A. M. Dirac, eponimo della medaglia concessa nel 1987 al Professore Clementi, ritenne che «le leggi fisiche fondamentali necessarie per la teoria matematica di una gran parte della Fisica e dell'intera Chimica sono completamente co-

nosciute; l'unica difficoltà sta soltanto nel fatto che l'esatta applicazione di queste leggi conduce ad equazioni troppo complicate per essere risolvibili». L'impressionante sviluppo tecnologico associato alla Seconda guerra mondiale fornì lo strumento che avrebbe contribuito in modo definitivo a superare le difficoltà menzionate da Dirac. Questo strumento fu il computer. Le potenze alleate investirono saggiamente un'enorme quantità di mezzi per sviluppare i primi computer digitali: COLOSSUS in Bletchley Park (Regno Unito), ENIAC in Arlington Hall (Stati Uniti) e MANIAC in Los Alamos (Stati Uniti), progettati da brillanti matematici come Alan Turing e John von Neumann. Il calcolo intensivo effettuato in tempi di guerra giustificò largamente gli investimenti realizzati, permettendo di decodificare i codici ENIGMA e PURPLE e facilitando i calcoli necessari per mettere a punto le terribili e definitive armi nucleari, sviluppate all'interno del Progetto Manhattan.

Dopo la guerra gli scienziati destinarono sempre più tempo di calcolo alle applicazioni accademiche nelle varie discipline, essendo la Chimica una delle più avvantaggiate con l'uso di questo nuovo strumento.

Il Professore Clementi inizia la sua carriera scientifica nel 1954, difendendo una tesi di dottorato in Spettroscopia presso il Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Pavia. Come lui ha scritto, fu una conferenza del Professore C. Coulson, uno dei precursori nell'impiego della Meccanica

quantistica nello studio del legame chimico, quella che determinò la sua vocazione scientifica. Realizzò diversi soggiorni postdottorali durante il periodo 1955-1961 in centri di grande prestigio internazionale. Dunque, nel laboratorio del Nobel Giulio Natta, il Professore Clementi analizzò, dalla prospettiva mecano-quantica, la conducibilità elettrica dei polimeri organici. Lavorò anche a Berkeley con il prestigioso chimico-fisico Kenneth S. Pitzer nello studio della stabilità di piccoli *cluster* di carbonio, predicendo per la prima volta l'esistenza di molecole di carbonio C_n , siano lineari che ad anello. Secondo le stesse parole del Professore Pitzer, «se fossimo andati abbastanza lontano in quest'indagine, saremmo potuti essere in grado di prevedere il fullerene C_{60} », per la cui individuazione sperimentale, quasi quarant'anni dopo, Harold W. Kroto, Robert F. Curl e Richard E. Smalley ricevettero il Premio Nobel. Tuttavia, le limitazioni della capacità computazionale dell'epoca lo impedirono. Nel 1960 collabora con il Professore Robert S. Mulliken (Premio Nobel nel 1966) nel famoso *Laboratory of Molecular Structure and Spectra* [Laboratorio di Strutture Molecolari e Spettri] del Dipartimento di Fisica dell'Università di Chicago, contribuendo attivamente nell'applicazione della Teoria degli Orbitali Molecolari — nel cui ambito è stata fondamentalmente sviluppata la Chimica teorica fino ai giorni nostri — allo studio di vari sistemi di interesse chimico. Il Professore Clementi descrive il suo soggiorno nel sopracitato laboratorio come

indicato di seguito: «L'atmosfera nel laboratorio di Mulliken era veramente emozionante, dato che eravamo consapevoli di essere membri di un laboratorio eccezionale riconosciuto a livello mondiale. Ci sentivamo parte del miglior laboratorio del mondo». Anche il mio maestro durante il soggiorno che feci negli anni '80 del secolo scorso nell'Università di Alberta (Canada), il Professore Serafin Fraga, pure lui membro del gruppo di Mulliken, che purtroppo non è più tra noi, lo descrive in modo molto simile: «Passai tre anni indimenticabili nel laboratorio di Mulliken a Chicago», scrive il Professore Fraga, «tre anni di intenso lavoro, consapevole del fatto che stavamo aprendo un nuovo orizzonte con l'uso, per la prima volta, di computer per lo studio della struttura molecolare». Nel 1967, il Professore Clementi sarebbe tornato a fare un nuovo soggiorno della durata di un anno in questo laboratorio, culminando uno studio sulla reazione tra l'ammoniaca (NH_3) e l'acido cloridrico (HCl) che fu una pietra miliare per la Chimica computazionale, poiché segnò l'inizio di quello che si conosce come «approssimazione supramolecolare», una metodologia spesso usata oggi. Il Professore Clementi ha evidenziato l'intensità del momento: «Costruire la superficie di potenziale della reazione $\text{NH}_3 + \text{HCl}$ », scrive, «fu emozionante; ogni sabato e domenica lavorando instancabilmente nella sala dei computer». La comunità scientifica ricevette i risultati con grande gioia e sia il quotidiano *The New York Times* sia la rivista *Time*

fecero riferimento a quest'indagine, raccolta in tre pubblicazioni scientifiche, con il Professore Clementi come unico firmatario, che occupano un posto fondamentale nella storia della Chimica computazionale. Infatti, il Professore Mulliken, nella cerimonia di ricevimento del suo Premio Nobel, nel dicembre del 1966, menziona fino a nove volte le indagini in corso del Professore Clementi, che sarebbero culminate nelle pubblicazioni sopracitate. È difficile trovare negli archivi della Fondazione Nobel un discorso in cui un premiato faccia questo ripetuto riferimento alle indagini di un altro collega. Il Professore Clementi aveva a quei tempi 35 anni ed i ricercatori più importanti del momento seguivano attenti ogni sua mossa.

Ma torniamo al 1961. Dopo aver ricevuto numerose offerte per lavorare nelle più prestigiose istituzioni, essendo particolarmente rilevante quella realizzata dal Nobel Gerhard Herzberg dal *National Research Council of Canada* [Consiglio Nazionale di Ricerca del Canada], il Professore Clementi decide finalmente di accettare, su consiglio del Professore Mulliken, un'offerta dell'*International Business Machines Corporation* (IBM) a San Jose, California, poiché questo gli permetterebbe di avere a sua disposizione la potenza computazionale richiesta per sviluppare i suoi molteplici progetti di ricerca.

Durante il periodo 1963-1965 pubblicò una serie di articoli, la maggior parte di essi come unico firmatario, che costituirono una nuova pietra miliare per la Chimica computazionale. In essi furono

anche tabulate funzioni d'onda atomiche, soluzioni dell'equazione di Schrödinger, per una buona parte degli elementi della tavola periodica. Per quanto riguarda l'impatto di quest'indagine, a titolo illustrativo, è opportuno sottolineare che una di queste pubblicazioni è stata citata circa 2500 volte secondo la *Web of Science*. Più tardi, nel 1974, si pubblicò una compilazione di tali funzioni d'onda che ebbe quasi 2000 citazioni. Un'opera ciclopea, propria di una persona di enorme talento e con un'eccezionale capacità di lavoro. Si tratta senza dubbio di contributi scientifici di straordinaria rilevanza, riservati a pochi.

Tornando al 1965, il Professore Clementi lanciò in quel periodo un programma postdottorale, *The IBM Visiting Scientist Program* [Il Programma di IBM per Scienziati Visitatori], che aprì le porte della Chimica computazionale a numerosi scienziati e ingegneri provenienti da tutto il mondo. IBM pagava molto bene e offriva l'opportunità di lavorare in un laboratorio di prestigio internazionale, sotto la guida di uno degli scienziati più rinomati del tempo. Tutti i giovani scienziati del periodo postdottorale sognavamo di raggiungere un destino così! Alcuni di essi siamo qui oggi per rendere omaggio al nostro maestro; la persona che ci diede la possibilità di ricevere un'eccellente formazione scientifica. Grazie Enrico in nome di tutti quelli che a suo tempo traemmo vantaggio da quel programma.

Per finire questo fertile periodo produttivo, nel

1969 il Professore Clementi viene nominato *IBM Fellow*, l'onore più alto concesso dall'azienda ad uno scienziato o ingegnere del suo personale. Basta dire che fino ad ora 5 sono stati i Premi Nobel che fanno parte di questo collettivo elitario. Un *IBM Fellow* può sviluppare qualsiasi progetto del suo interesse in qualsiasi sede di IBM in tutto il mondo, ricevendo un finanziamento adeguato. Rappresenta, quindi, la panacea per qualsiasi ricercatore. Il Professore Clementi non avrebbe perso l'opportunità offerta da IBM.

Nel 1974, il Professore Clementi pubblica, in collaborazione con O. Matsuoka e M. Yoshimine, il miglior potenziale che sia mai stato costruito per rappresentare l'acqua allo stato liquido. Generato interamente a partire da calcoli *ab initio*, cioè senza l'inclusione di parametri empirici, ha avuto più di 1200 citazioni nella letteratura scientifica.

Motivi personali costrinsero, però, il Professore Clementi ad aprire una parentesi di 5 anni, trasferendosi in Italia, dove creò e diresse un Dipartimento di Calcolo nella Società Montedison e vinse, con il primo posto, un concorso di cattedratico all'università.

È attribuito a sir Humphry Davy, fondatore dell'Elettrochimica e Presidente della *Royal Society* [Società Reale] londinese, l'aneddoto di vantarsi del suo maggior contributo alla scienza: la scoperta dello studioso Faraday. Il Professore Clementi conobbe durante questa parentesi europea la Professoressa Giorgina Corongiu, che fu la sua più vicina

ed efficiente collaboratrice nella nuova fase che si aprì con il reinserimento lavorativo del Professore Clementi in IBM dopo aver rinunciato ad una cattedra sia a Roma che a Pisa, fondando lo *Scientific and Engineering Computations Center* [Centro di Calcolo Scientifico ed Ingegneristico] prima a Poughkeepsie e poi a Kingston, entrambe le città dello stato di New York, dove si svilupparono ricerche d'avanguardia durante il periodo 1979-1991 nel campo delle Simulazioni molecolari di sistemi di interesse biologico.

Molti contributi fondamentali sono stati effettuati in quel periodo dal laboratorio del Professore Clementi. Per non allungare il mio intervento più di quanto sia ragionevole, ne metterò brevemente in evidenza due.

Nel 1983, il Professore Clementi ed il suo gruppo incominciano a progettare ed a mettere a punto un nuovo sistema operativo (*software e hardware*) battezzato con il nome *Loosely Coupled Array of Processors* [Processori Vettoriali ad un Basso Grado di Accoppiamento], il quale consentiva di parallelizzare i codici delle diverse applicazioni scientifiche, competendo vantaggiosamente con l'allora standard di parallelizzazione: i supercomputer CRAY. Il modello si utilizzò con successo in varie istituzioni americane e fu esportato nell'ex Unione Sovietica.

D'altra parte, a metà degli anni '80 del secolo scorso, il Professore Clementi introdusse il concetto di «Global Simulation», il quale costituì un modello di sviluppo nell'ambito della Chimica computazio-

nale. Ad esempio, la *Global Simulation* permette, attraverso una serie di codici, partendo dalla risoluzione dell'equazione di Schrödinger per una molecola di acqua (mondo microscopico), di raggiungere la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes (mondo macroscopico). In questo modo, a partire dalla funzione d'onda della molecola di acqua, è possibile prevedere il movimento delle maree sperimentalmente osservato. Venne così fatto con notevole successo nel caso della baia di Buzzards, a Capo Cod, Massachusetts. Tutto ciò basandosi su calcoli *ab initio* che non incorporano parametri empirici: Una vera prodezza teorica!

Nel 1993, il Professore Clementi fu nominato *Full Professor (Exceptional Class)* in Chimica teorica dall'Università Louis Pasteur, a Strasburgo, su proposta del Nobel Jean-Marie Lehn. Lì prestò servizio fino all'anno 2000.

Oggigiorno il Professore Clementi continua ad arricchirci con le sue pubblicazioni. In un articolo apparso di recente, in cui affronta l'evoluzione dei computer e delle simulazioni, suggerisce l'estensione dell'interdisciplinarietà — un segno caratteristico del chimico computazionale —, in modo da includere la collaborazione con esperti in discipline umanistiche. Ciò comporterebbe, secondo il Professore Clementi, un'evoluzione dall'*Homo Sapiens* a quello da lui chiamato *Homo Novus*, nome con cui gli antichi romani ricompensavano quei plebei che riuscivano ad entrare a far parte dell'aristocrazia. Un'allusione all'evoluzione sperimentata dal

chimico computazionale quando il suo campo di interesse si estende dalla Chimica alla Biologia.

Il tempo stringe e non voglio stancarvi con i numerosi premi, distinzioni ed onori ottenuti dal Professore Clementi. Per finire, vorrei solo trarre dall'imponente *curriculum vitae* due aspetti decisamente insigni. Da una parte, ha pubblicato mezzo migliaio di articoli che hanno avuto più di 20000 citazioni nella letteratura scientifica. In secondo luogo, possiede un indice H 75 — cioè 75 articoli del professore Clementi, buona parte dei quali come unico firmatario, sono stati citati almeno 75

volte —, essendo stato uno dei 300 scienziati più citati in tutte le aree di conoscenza durante il periodo 1965-1978, secondo la rivista bibliometrica *Current Contents*.

Pertanto, considerati ed esposti tutti questi meriti, degnissime Autorità e Senatori Accademici, chiedo con tutta la mia considerazione e prego vivamente di concedere e conferire al Professore Enrico Clementi il grado massimo di Dottore *honoris causa* dell'Università di Oviedo.

Grazie mille.

Discurso del Profesor

Don Enrico Clementi



Enrico Clementi

Sr. Rector Magnífico
Señores Claustales
Ilustres miembros de la Universidad de Oviedo
Honorables Autoridades de Oviedo
Queridos Compañeros y Estudiantes
Distinguidas Señoras y Señores
Estimado Profesor José Ángel Sordo

Quiero agradecer al Rector Magnífico, el profesor Santiago García Granda, a los Señores Claustales, a la Señora Decana de la Facultad de Química, la profesora Susana Fernández González, ala Directora del Departamento de Química Física y Analítica, la profesora Rosana Badía Laíño, a los compañeros de la Facultad de Química y a mi padrino, el prof. José Ángel Sordo, por vuestra decisión de honrarme como Doctor *honoris causa*, que acepto con sumo gusto.

En primer lugar, quiero presentaros mis más sinceras disculpas por no hablar la lengua de Cervantes y García Lorca; usaré, en cambio, la lengua de Dante y Petrarca.

Nací en noviembre de 1931 en un pueblecito de la provincia de Trento, en los Alpes italianos, al sur de Austria; aunque lejos del frente bélico, vi y me acuerdo de la devastación y de los horrores de la Guerra Mundial.

Comencé mis estudios en el liceo clásico de Trento poco después del final de la guerra. Recuerdo mi gran interés por la filosofía de Platón a Aristóteles, Kant, Hegel, Kierkegaard, y de las corrientes vie-

nas científico-filosóficas de inicios del siglo XX. A pesar de estos intereses, en 1948 me inscribí en la Facultad de Química de Pavía, donde había obtenido una beca que me aseguraba comida y alojamiento gratuitos en el entonces Colegio Mayor «Fratelli Cairoli». Uno de los motivos por los que elegí Químicaera porque su plan de estudios requería un año más de formación con respecto a Física o a Matemáticas: me arrogué el derecho de «corregir» el currículum, si bien las «correcciones» podían comportar un compromiso ulterior con «tiempo de estudio» adicional.

Mi tesis de licenciatura, con los profesores Giulotto y Chiarotti como supervisores, versaba sobre la Espectroscopia de los centros de color en cristales halogenuros alcalinos, un trabajo de laboratorio desarrollado en el Departamento de Física y no en el de Química, una elección fuera de lo común, pero que para mí solo era una «corrección» al tradicional plan de estudios de la licenciatura en Química.

Graduado en 1954, enseguida empecé un año de posdoctorado con el profesor Giulio Natta en el Politécnico de Milán; era el único «teórico» entre los eminentes especialistas en Química de polímeros y técnicas de rayos X e infrarrojos. Muy pronto me di cuenta de que mis superficiales nociones de Química cuántica (aprendidas de manera autodidacta, ya que en aquella época la Química cuántica no era materia de aprendizaje) eran completamente irrelevantes para la tarea que Natta me había asignado. La lectura del libro *Valence* de Charles Coulson hizo

que me enamorase de la aproximación de *orbitales moleculares*. Así me zambullí en la lectura de los trabajos de Robert S. Mulliken. Constatada mi incapacidad de realizar mediciones sobre la conductividad de un nuevo polímero, el poliacetileno, a causa de la persistente presencia de impurezas, me ofrecí a medir su punto de fusión, visto que mis compañeros no lo lograban. Natta me dio su permiso, pero no apreció la explosión que causé en su laboratorio aun cuando esto comportó una buena evaluación del punto de fusión y... «solo algunos puntos de sutura» en la cara de su codirector, el profesor Mazzanti, y en mi caso algunos rasguños. Como consecuencia, Natta aceptó de buen grado mi petición de pasar la mayor parte de mi tiempo en la biblioteca para estudiar los trabajos de Mulliken. En ese periodo el profesor Amaldi de la Universidad de Roma contactó con Natta, comunicándole una propuesta recibida por el profesor Michael Kasha, que buscaba a un joven investigador italiano. Michael Kasha era un notable espectroscopista en la Universidad Estatal de Florida de Tallahassee, Florida. Natta me preguntó si la oferta me interesaba y acepté.

En aquella época el viaje Europa-América poco tenía que ver con las pocas horas de hoy en día. Para llegar a Tallahassee cogí el tren de Trento a El Havre, y en barco, con cinco días de borrasca, desembarqué en Nueva York. Luego continué en tren hasta Jacksonville en Florida, a donde llegué a las tres de la madrugada. Al tomar el tren me con-

duciría a Tallahassee, descubrí «la segregación». En Jacksonville, constatando que casi todos los vagones ya estaban ocupados, pedí a un mozo, un hombre de color, que me ayudase a subir a un vagón prácticamente vacío. Este se negó, casi asustado por esta petición mía que le había parecido «provocativa»; me explicó que no debía subir a aquel vagón porque estaba reservado para la gente de color. Entré prepotente y me di cuenta del estupor, o mejor dicho, del miedo de las personas que lo ocupaban. Traté de hablar con ellos para tranquilizarlos; mi inglés era tan pobre que inmediatamente comprendieron que era un extranjero desconocedor de las reglas de segregación.

Así comenzó mi primer largo periodo en los EEUU: dos años en Tallahassee (1956-1957), más de un año (1958-1959) en la Universidad de California en Berkeley, dos años (1959-1961) en la Universidad de Chicago y, por último, un largo periodo (1961-1974) en el Departamento de Investigación de IBM, en su laboratorio de San José en California.

En Tallahassee, Mike Kasha fue mi primer «jefe». Su entusiasmo era contagioso; también era excepcional su aprecio por la ciencia, el arte, la política y por cualquier aspecto de la vida. A día de hoy considero el año 1956 en Florida como mi primer año como «químico teórico».

No recuerdo haberme topado con nociones relativas a los ordenadores, obviamente inexistentes en Pavía, Milán y Tallahassee, del mismo modo que

eran desconocidos para mí los usuarios de estos instrumentos que se estaban difundiendo.

La Química computacional estaba completamente desajustada: su desarrollo teórico y metodológico estaba muy avanzado, si bien no existían instrumentos para resolver numéricamente cualquier aplicación no trivial. De hecho, años antes de mi nacimiento o poco después, la Física ya había establecido todas sus bases teóricas. Destacan, entre muchos, Schroedinger, Dirac, Pauli, Slater, Hartree, Fock, Mulliken, Hund, Oppenheimer, Pauling, Heitler y London.

En la primera década de la posguerra, la humanidad entraba en la era de la energía nuclear y de los ordenadores. Hoy la ciencia se basa en tres pilares: experimentos verificables; un conjunto autoconsistente de teorías; y simulaciones de modelos implementados por potentes ordenadores.

De Florida me mudé a California. Nochevieja de 1958: habiendo llegado a Berkeley el día anterior, la mañana del 1 de enero, si bien era festivo, fui a la Universidad de California, donde –al entrar en el Instituto de Química– tuve el gusto de estrechar la mano de mi nuevo maestro: el profesor Kenneth S. Pitzer. Utilicé por primera vez un ordenador para estudiar las moléculas de átomos de carbono: un IBM-650 del centro de computación de la *Atomic Energy Commission* [Comisión de Energía Atómica de los Estados Unidos], cómodamente situado en la colina suprayacente al Instituto de Química.

En el verano de 1959, Pitzer me mandó a un con-

greso en Boulder, Colorado: no sabíamos que se convertiría en un hito de la Química teórica y computacional. En el congreso me encontré por primera vez con muchas personalidades importantes como Robert Mulliken, para mí el héroe número uno, y un estudiante de Clemens Roothaan, Douglas McLean, que posteriormente pasó a ser uno de los pilares de mi futuro grupo en IBM en San José. La presentación de mi trabajo sobre la molécula C_2 le gustó a Mulliken, que me invitó a Chicago en calidad de investigador posdoctoral suyo. Feliz y entusiasmado acepté y prometí llegar a Chicago en un mes, olvidando que ya había aceptado mi permanencia en Berkeley por otros seis meses. En un mes, a finales del verano de 1959, estaba en el famoso *Laboratory of Molecular Structure and Spectra* (LMSS) [Laboratorio de Estructuras Moleculares y Espectros] de la Universidad de Chicago con el profesor Mulliken.

Llegué a Chicago cuando el grupo de Mulliken probablemente estaba en el periodo de máximo esplendor, uniendo de manera excepcional la Química teórica con el cálculo computacional. Roothaan (Holanda), McLean (Australia), Yoshimine (Japón), Fraga (España), Moccia (Italia), Weiss (EEUU), Huzinaga (Japón), Malli (India) y Kolos (Polonia) eran incomparables maestros en el arte de utilizar el ordenador: un UNIVAC 113A que se encontraba en la Base de las Fuerzas Aéreas Wright-Patterson en Dayton, Ohio. En esta época era frecuente que se tuviesen que hacer largos viajes para poder acceder a un ordenador.

También para mí había llegado el momento de encontrar una sede de trabajo fija y estable. Se me presentaron tres posibilidades: la oferta del Premio Nobel Gerald Herzberg en Ottawa, Canadá; una segunda en el grupo de biofísica del profesor Borsellino en la Universidad de Génova, en Italia; y la tercera, una antigua oferta de trabajo en un laboratorio embrionario del Departamento de Investigación de IBM, situado en San José (California), donde un año antes había impartido un seminario titulado «Grandes ordenadores y pequeñas moléculas». Acepté esta última, dado que me garantizaba un fácil acceso a grandes ordenadores, una condición esencial para realizar mi plan de investigación.

Los estudios en Tallahassee, Berkeley y Chicago habían madurado en mi interior un plan de acción: ante todo dar a conocer a la comunidad técnico-científica la importancia del uso de los ordenadores y los relativos modelos de computación y, al mismo tiempo, tratar de resolver con el cálculo computacional problemas inicialmente «simples», pero luego cada vez «más complejos», empezando con el mundo de la Química física y pasando también después a los problemas sociales.

Estaba convencido de que para difundir las nuevas metodologías sería esencial: a) ofrecer códigos de programas computacionales gratuitamente a las universidades y a los centros de investigación con documentación completa y con ejemplos de *input-output*; b) ofrecer a selectos jóvenes investigadores

de cualquier nación largas estancias posdoctorales en el laboratorio IBM en el que trabajaba. Este plan, por una parte facilitaba nuevos contactos de mercado entre IBM y el mundo académico; por otro, me aseguraba una notable libertad investigadora.

En San José pasé rápidamente de miembro del personal investigador principal y más tarde a director de un nuevo departamento denominado *Department of Large Scale Scientific Computations* [Departamento de Computación Científica a Gran Escala]. En junio de 1968 fui elegido becario IBM y en conformidad con el estatuto de la sociedad era libre de proseguir mi trabajo dondequiera que me pluguiese y con un soporte financiero adecuado. Decidí quedarme en San José y continuar mi trabajo. Posteriormente pedí y logré ser exonerado de mis obligaciones de director para poder dedicarme completamente a mi investigación científica.

Una primera tarea importante fue la escritura de un programa general para el cálculo computacional a nivel Hartree-Fock para el conjunto de bases (*basis set*) gaussianas o de Slater, con la corrección relativista obtenida mediante el método perturbacional. Este código, originariamente llamado IBMOL, fue solicitado con la documentación pertinente y distribuido gratis a aproximadamente doscientos centros universitarios o de investigación. También fue automático un plan de distribución de las revisiones, correcciones y extensiones del código. Se derivaron muchas publicaciones de cálculos moleculares que

demostraban cómo la Química computacional estaba convirtiéndose en una realidad.

Cuando en 1966 regresé a Chicago como profesor visitante, en un año sabático del IBM, estudié las reacciones químicas no con el tradicionalmente usado método semiempírico, conocido como *Valence Bond*, sino con un nuevo procedimiento que fue denominado *enfoque supramolecular*: en lugar de una molécula a la vez, todas las moléculas participantes en la reacción eran tomadas en consideración simultáneamente. Simulé la reacción de una molécula de amoníaco con una de ácido clorhídrico. Los resultados numéricos fueron validados años más tarde por datos experimentales. Las variaciones de la densidad electrónica fueron reproducidas gráficamente en un vídeo que se hizo muy popular, tanto como para ser publicitado incluso en la prensa, por ejemplo en el *New York Times* y en la revista *Time*.

A finales de los años sesenta, IBM estaba preocupada por los problemas legales que la obligaron a la separación de las ventas de *hardware* de las de *software*. Fue así como la compañía disminuyó su interés por la producción de ordenadores científicos para centrarse en los comerciales. También decidió anular la construcción de un innovador y rápido ordenador científico ya casi listo para salir a producción; las previsiones de mercado habían establecido que los costos de desarrollo se habrían igualado solo con la venta de al menos 19 máquinas. Sorprendido y desilusionado por la manifestada cancelación, envié una carta al presidente de la compañía, Thomas J.

Watson, preguntándole: «¿Por qué debemos ser segundos?». Después de unos días fui convocado en Armonk, sede de IBM, para presentar mi opinión al Comité Técnico Corporativo. Destaqué que la construcción de aquel ordenador tenía que llevarse a cabo porque era importante para el progreso científico de la humanidad; nótese que la noche anterior un hombre había dado los primeros pasos en la luna. El aparato, el IBM-195, fue construido y el primer modelo fue otorgado a San José, si bien IBM solo logró vender 17 unidades.

A finales de 1974 me retiré de IBM para volver a Italia al haber recibido una interesante oferta de la Sociedad Montedison que me permitía ser director de un nuevo grupo de investigadores en el Instituto de Investigación «Guido Donegani», con sede en Novara (1974-1979).

En aquella época la Sociedad Montedison, con dos importantes industrias farmacéuticas, la Carlo Erba y la Farmitalia, posteriormente fusionadas, representaba la Química fina en Italia. Por lo tanto, se me hizo natural dirigir la investigación del grupo, llamado *Dipartimento di Calcolo Chimico* [Departamento de Química Computacional], hacia temas de Bioquímica. Es en este periodo cuando se completó un estudio sobre la catálisis Ziegler-Natta en colaboración con Octavio Navarro y Carlos Bunge de la UNAM en Ciudad de México, donde pasé algunos meses.

Poco a poco empecé a darme cuenta de que el modo abierto, aunque muy competitivo, de obrar

en los EEUU era de lejos superior a los compromisos, la lentitud y los personalismos típicos de la investigación en Italia. Así pues, decidí regresar a EEUU: pedí a, y obtuve de, IBM-EEUU la posibilidad de crear un grupo de investigación, esta vez en el estado de Nueva York, a orillas del Hudson: primero en Poughkeepsie (1979-1984) y luego en Kingston (1984-1991). En ese periodo, dos ofertas distintas para una cátedra de Química teórica, una en la Universidad de Pisa y la segunda en la Universidad de Roma, fueron rechazadas porque ya había aceptado otros compromisos.

En los años ochenta la industria electrónica había llevado al límite a la tecnología a fin de producir microchips; al mismo tiempo, muchos problemas de gran relevancia científica y social, dada su complejidad numérica, quedaron sin resolver. Así, usuarios insatisfechos empezaron a buscar alternativas en la construcción de ordenadores. En algunos centros universitarios caló la idea de construir ordenadores capaces de realizar contemporáneamente más de una operación lógica o numérica, es decir, ya no eran ordenadores *escalares* (una operación a la vez), sino ordenadores *paralelos* (múltiples operaciones al mismo tiempo).

Yo también estaba interesado: era evidente que los códigos de mecánica cuántica, para átomos y moléculas, y aquellos para simulaciones de Montecarlo y dinámica molecular podían ser adaptados fácilmente a ordenadores con arquitectura paralela, reduciendo notablemente los tiempos de ejecución.

Tenía un problema: mi grupo era relativamente pequeño y carecía de especialistas en *hardware*. En 1983 conecté un procesador vectorial (*array processor*), FPS-194, con un ordenador IBM-4341. Al cabo de unos meses los procesadores vectoriales pasaron a ser tres y seis en 1984. La comunicación entre las máquinas se producía de forma equivalente a la de un sistema telefónico, donde n teléfonos «subordinados» pueden conectarse a una central telefónica «dominante» que regula el tráfico, asigna las tareas y recibe mensajes de los «subordinados». Los «subordinados» podían comunicarse entre ellos de manera limitada, por lo que la comunicación no era fuerte y concisa, sino débil y limitada: una comunicación «de bajo grado». Por este motivo el sistema fue llamado LCAP, es decir, *Loosely Coupled Array of Processors* [Procesadores Vectoriales de Bajo Grado de Acoplamiento]. El sistema, ampliado a 10 procesadores FPS, se mejoró con la incorporación de un bus y una memoria masiva compartida por todos los procesadores. Construimos tres modelos: LCAP1, LCAP2 y LCAP3. En poco tiempo ajustamos al nuevo aparato todos nuestros programas de Química computacional. *Benchmarks*, realizados en varios tipos de código, mostraron que LCAP superaba en velocidad a los ordenadores CRAY y CDC, los superordenadores de entonces. Nuestro ordenador, dada su simplicidad y eficiencia, fue «imitado» por el Centro de Investigaciones de IBM-Italia en Roma; por la Universidad Cornell, Ithaca, Nueva York; por el CERN de Ginebra.

El Dr. Roald Z. Sagdev, entonces director del Centro Espacial de la Academia de Ciencias de la URSS, montó un ordenador siguiendo nuestro modelo; colaboramos en la configuración de su *software* y por ello envié a Moscú a mi colaborador, el Dr. J. Dietrich, a pesar de estar en plena Guerra Fría.

A mediados de los años ochenta, puse a punto una metodología llamada *Global Simulation*, referida en su totalidad en las dos series de volúmenes MO-TECC (*Modern Techniques in Computational Chemistry* [Técnicas Modernas en Química Computacional]) y, años después, METECC (*Methods and Techniques in Computational Chemistry* [Métodos y Técnicas en Química Computacional]). Estos volúmenes incluían códigos de cálculo, con documentación y ejemplos de *input/output*; de átomos y moléculas; de modelos del tipo Hartree-Fock, no relativista y relativista, funcionales de la densidad, interacción de configuración, CAS-SCF, Hylleraas-CI, Montecarlo, dinámica molecular, fluidodinámica, microdinámica y programas gráficos.

Por desgracia, en 1991, la alta dirección de IBM decidió desmovilizar a su enorme número de trabajadores: en poco tiempo aproximadamente doscientos mil empleados fueron o despedidos o prejubilados. Se me ofreció un traslado a IBM-Italia, donde estuve unos pocos meses, a tiempo para empezar en un nuevo centro de investigación en Cerdeña, el CRS4, *Centro Ricerche e Sviluppo Studi Superiori Sardegna* [Centro de Investigaciones y Desa-

rollo de Estudios Superiores de Cerdeña], posteriormente presidido por el Premio Nobel Carlo Rubbia.

Dejé IBM-Italia para asumir dos cargos simultáneamente, uno en la Universidad Pasteur en Estrasburgo, invitado por el Premio Nobel Jean-Marie Lehn; y el segundo en el CRS4. En 1998, la Universidad de Namur, Bélgica, me honró con el título de Doctor *honoris causa* con el profesor Jean-Marie André como padrino.

Era típico de mi investigación dirigirmis estudios personales, empezando con sistemas simples, los átomos, para luego llegar a sistemas cada vez más complejos.

La materia, tanto inorgánica como orgánica, está compuesta por agrupaciones de átomos. En Chicago había tenido la oportunidad de estudiar y utilizar un programa atómico Hartree-Fock, escrito por Roothaan y colaboradores. Hago presente que en los años sesenta el cálculo Hartree-Fock para un solo átomo era considerado un resultado adecuado para una publicación en prestigiosas revistas científicas. Para demostrar también el poder de los ordenadores, decidí publicar decenas y decenas de cálculos atómicos en una misma publicación. En San José continué con cálculos sistemáticos de energía y función de onda de átomos e iones. Energías y funciones de onda atómicas fueron recogidas inicialmente en un volumen, *Tables of Atomic Functions*, publicado en el *Journal of Research and Development* de IBM. Una nueva versión, ampliada a es-

tados excitados y series isoelectrónicas, escrita en colaboración con la profesora Carla Roetti, fue publicada en 1974 como *Special Issue of Atomic Data and Nuclear Data Tables*. Estos estudios me dieron la oportunidad de cuantificar la energía de correlación, de calcular la energía relativista y de revisar las famosas reglas de Slater para el tramado electrónico.

Había llegado el momento de dar un paso adelante, de los átomos a las moléculas. En Berkeley, con Pitzer, usando técnicas semiempíricas, estudiamos las moléculas C_2 y C_3 , conocidas a nivel experimental, y también predijimos la existencia de moléculas lineales de carbono, de C_4 a C_{17} , y de estructuras moleculares de lazo cerrado. Muchos años después, la comunidad de químicos fue sorprendida por la noticia de que los átomos de carbono pueden formar moléculas esféricas como el fulleren, el C_{60} . A mí el paso de estructuras de lazo cerrado a estructuras esféricas ¡no me pareció tan sorprendente! *Nihil sub sole novum*.

En Chicago, en 1966, me centré en una molécula: la HF. Decidí abandonar el método de orbitales moleculares como Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (CLOA) y construir, sobre todo, un conjunto de bases (*basis set*) suficientemente grande que garantizase una satisfactoria representación de los átomos H y F disociados y, luego, añadir funciones de polarización de ambos átomos, una técnica denominada posteriormente *balanced basis set* [conjunto de bases equilibrado]. El estudio aclaró

cuantitativamente la importancia de la energía de correlación *molecular* en relación con la suma de las energías de correlación atómica de los átomos que constituyen la molécula.

Publiqué una serie de artículos con el título general *Study of the electronic structure of molecules*, que proporcionaba cálculos sobre la molécula de agua, pequeñas moléculas orgánicas y moléculas o iones que interactúan con el agua. A estos trabajos le sucedieron artículos sobre las soluciones acuosas de iones o moléculas, estudiadas con el método Montecarlo de Metropolis o de la dinámica molecular. El problema de cuantificar la energía de correlación electrónica se afrontó con dos enfoques distintos. Para las moléculas, proponiendo una corrección directamente en el cálculo Hartree-Fock, se utilizó una fórmula empírica basada en la densidad electrónica. Esto se producía aproximadamente diez años antes de que la comunidad de Química computacional usara las funciones de densidad como superación del método Hartree-Fock. Para los átomos empleé el método *Complete Multi-Configuration*, propuesto en colaboración con el prof. Alain Veillard. A día de hoy el método es conocido con el acrónimo CAS-SCF.

Otros temas de investigación fueron la determinación con cálculos cuántico-mecánicos de potenciales analíticos y su fiabilidad y transferibilidad. Con estos potenciales se llevaron a cabo simulaciones tipo Montecarlo y dinámica molecular de reacciones entre biomoléculas, de moléculas en disolución,

del ADN en varias configuraciones, de enzimas y proteínas en disolución.

La curiosidad por conocer de una manera práctica el límite máximo de complejidad de las simulaciones de los grandes sistemas multimoleculares llevó a la confrontación de los resultados obtenidos con técnicas estándar de Navier-Stokes con los obtenidos con métodos de microdinámica. Se tuvieron en consideración flujos, por ejemplo flujos con barreras, la formación de células de Bernard y las simulaciones de flujos en la bahía de Buzzards en Cape Cod, Massachusetts. Algunos de estos trabajos fueron realizados en colaboración con investigadores del grupo del Premio Nobel Ilya Prigogine, que conocí durante una estancia en la Universidad Libre de Bruselas, donde impartí una serie de clases en la cátedra internacional Francqui.

Esta investigación preveía futuros límites de cálculo de grandes sistemas biológicos o de modelos sociales. En este sentido, ya años antes había hecho en Novara una simulación fluidodinámica sobre la contaminación atmosférica en la zona Venecia-Porto Marghera. Los datos recogidos por las estaciones de control nos los proporcionaba el Ente de la zona de Venecia. Los resultados, desfavorables para el grupo industrial Montedison, no gustaron a la alta dirección y pude publicarlos solo años después.

Jubilado desde el 2000, vivo en Como con mi mujer, la profesora Giorgina Corongiu, docente en la Universidad de Insubria de las asignaturas de Química cuántica y Química computacional, cam-

pos en los que colaboró conmigo hasta 1976. Es coautora de más de una centena de mis más de cuatrocientos artículos científicos. Buena parte de mi primer año de jubilación lo pasé en Bonn y en Garching (Alemania) como miembro Von Humbolt, gracias al interés de la profesora Sigrid Peyerimhoff. En Como asistí a la Academia de Bellas Artes «Guido Galli» para mejorar la técnica de pintura al óleo, iniciada en mi juventud. En el segundo curso pasé tres meses en Valencia (España) como estudiante de la Real Academia de Bellas Artes de San Carlos. En la actualidad me ocupo de la revisión de un pequeño volumen titulado *Dove siamo e chi siamo*, publicado sobre todo para obligarme a actualizarlo continuamente.

Mirando hacia adelante, espero que en un futuro próximo la Química computacional, o mejor dicho, que la metodología de la *Global Simulation* se centre en tres temáticas: investigación para mejorar nuestro medio ambiente, para ampliar el uso de la inteligencia artificial y para entender los mecanismos que regulan la actividad cerebral a la que llamamos «pensamiento».

Por desgracia estos escenarios seguirán teniendo intenciones vacías a menos que la enseñanza se comprometa a ofrecer asignaturas de programación tanto en los centros de primaria como de secundaria. Una nación de vanguardia en informática tiene óptimas probabilidades de emerger sobre todas las demás. Eso sí, habrá un obstáculo: la falta de docentes preparados.

Estos son solo escenarios para futuras direcciones de las ciencias computacionales: está claro que todavía estamos en los primeros pasos de un camino destinado a llevarnos hacia un «saber» nuevo

mucho más profundo y a muchas nuevas aplicaciones.

Gracias por vuestra atención.

Discorso del Professore

Don Enrico Clementi

Magnifico Rettore
Egredi Senatori Accademici
Illustri membri dell'Università di Oviedo
Onorevoli Autorità di Oviedo
Cari Colleghi e Studenti
Gentili Signore e Signori
Stimato Professore Josè Angel Sordo

Desidero ringraziare il Magnifico Rettore, Professor Santiago Garcia Granda, i Senatori Accademici, la Signora Preside della Facoltà di Chimica, Professoressa Susana Fernández González, il Direttore del Dipartimento di Chimica-Fisica e Analitica, Professoressa Rosana Badía Laiño, i colleghi della Facoltà di Chimica ed il mio padrino Prof. Josè Angel Sordo per la vostra decisione di onorarmi come Doctor Honoris Causa; accetto con grande piacere.

Innanzitutto, voglio presentarvi le mie sentite scuse per non parlare la lingua di Cervantes e García Lorca; userò invece la lingua di Dante e Petrarca. Sono nato nel novembre del 1931, in un paesino della provincia di Trento, nelle Alpi italiane, a sud dell'Austria; anche se lontano dal fronte bellico, ho visto e ricordo le devastazioni e gli orrori della guerra mondiale.

Iniziai gli studi al liceo classico di Trento, poco dopo la fine della guerra. Ricordo il grande interesse per la filosofia da Platone ad Aristotele, Kant, Hegel, Kierkegaard, e delle correnti viennesi scientifico-filosofiche del primo novecento. Malgrado

questi interessi, nel 1948, mi iscrissi alla facoltà di chimica a Pavia, dove avevo vinto una borsa di studio che mi garantiva vitto ed alloggio gratuiti all'allora Collegio di merito Fratelli Cairoli. Uno dei motivi per scegliere chimica era che il piano di studi in chimica richiedeva un anno di studio in più rispetto a fisica o matematica: mi arrogavo il diritto di "correggere" il curriculum, anche se le "correzioni" avrebbero potuto comportare un ulteriore impegno con addizionali "tempi di studio."

La mia tesi di laurea, con i Professori Giulotto e Chiarotti come supervisori, verteva sulla Spettroscopia dei Centri di Colore in Cristalli alogenuro-alcalini, un lavoro di laboratorio svolto nel dipartimento di fisica anziché in quello di chimica, una scelta fuori dal comune, ma, per me, solo una "correzione" al piano tradizionale di studi della laurea in chimica.

Laureatomi nel 1954, iniziai subito un anno di post-dottorato con il Professor Giulio Natta al Politecnico di Milano; ero il solo "teorico" tra eminenti specialisti in chimica dei polimeri e tecniche a raggi-X e infrarosso. Ben presto mi resi conto che le mie superficiali nozioni in chimica quantica (imparate da auto-didatta, dato che a quei tempi la chimica quantica non era materia di insegnamento) erano del tutto irrilevanti per il compito assegnatomi da Natta. La lettura del volume Valence di Charles Coulson mi aveva portato ad innamorarmi dell'approssimazione degli *orbitali molecolari*. Così mi tuffai nella lettura dei lavori di Robert S. Mulli-

ken. Constatata la mia incapacità di portare a termine misure sulla conducibilità di un nuovo polimero, il poli-acetilene, a causa dalla persistente presenza di impurità, mi offrii di misurarne il punto di fusione, visto che i miei colleghi non vi riuscivano. Natta mi diede il suo permesso, ma non apprezzò l'esplosione che causai nel suo laboratorio, anche se questo comportò una buona valutazione del punto di fusione e ... "solo alcuni punti di sutura" sul viso del suo co-direttore, il Professor Mazzanti, ed alcuni graffi per me. Come conseguenza Natta accettò di buon grado la mia richiesta di trascorrere gran parte del mio tempo in biblioteca per studiare i lavori di Mulliken. In quel periodo il Professor Amaldi dell'Università di Roma contattò Natta, comunicandogli una richiesta pervenutagli dal Professor Michael Kasha che cercava un giovane ricercatore italiano. Michael Kasha era un noto spettroscopista alla Florida State University a Tallahassee, Florida. Natta mi chiese se l'offerta mi interessasse ed io accettai.

A quei tempi il viaggio Europa-America era molto diverso dalle poche ore di oggi. Per raggiungere Tallahassee presi il treno da Trento a Le Havre, e per nave, con cinque giorni di burrasca, approdai a New York. Poi, in treno fino a Jacksonville in Florida, dove arrivai alle tre del mattino. Nel prendere il trenino che mi avrebbe portato a Tallahassee, scoprii "la segregazione". A Jacksonville, constatato che quasi tutti i vagoni erano già occupati, chiesi ad un facchino, un uomo di colore, di aiutarmi

a salire su un vagone quasi vuoto. Costui rifiutò, quasi impaurito dalla mia richiesta che gli era apparsa "provocatoria"; mi spiegò che non dovevo salire su quel vagone perchè era riservato alla gente di colore. Vi entrai di prepotenza, e mi accorsi dello stupore, anzi paura, delle persone che lo occupavano. Cercai di comunicare con loro per tranquillizzarli; il mio inglese era così povero che subito capirono che ero uno straniero ignaro delle regole della segregazione.

Inizii così il mio primo lungo periodo negli USA: due anni a Tallahassee (1956-1957), oltre un anno (1958-1959) alla California University a Berkeley, due anni (1959-1961) all'University of Chicago, ed infine un lungo periodo (1961-1974) all'IBM Research Division nel laboratorio di San Jose in California.

A Tallahassee, Mike Kasha fu il mio primo "boss". Il suo entusiasmo era contagioso; eccezionale era pure il suo apprezzamento per la scienza, l'arte, la politica, e per ogni aspetto della vita. Oggi considero l'anno 1956 in Florida come il mio primo anno da "chimico teorico".

Non ricordo di essermi imbattuto su nozioni riguardanti elaboratori elettronici, certo inesistenti a Pavia, Milano e Tallahassee, così come ignoti mi erano eventuali utenti di questi strumenti che si stavano diffondendo.

La chimica computazionale era completamente sbilanciata: il suo sviluppo teorico e metodologico era molto avanzato mentre non esistevano strumenti

per risolvere numericamente una qualsiasi applicazione non triviale. Infatti, anni prima della mia nascita o poco dopo, la fisica aveva posto tutte le basi teoriche. Noto fra i molti, Schroedinger, Dirac, Pauli, Slater, Hartree, Fock, Mulliken, Hund, Oppenheimer, Pauling, Heitler e London.

Nel primo decennio del dopo-guerra, l'umanità entrava nell'era dell'energia nucleare e degli elaboratori elettronici. Oggi la scienza si basa su tre pilastri: esperimenti verificabili; un insieme auto-consistente di teorie; simulazioni di modelli implementati per potenti calcolatori elettronici.

Dalla Florida mi trasferii in California. Giornata di Capodanno del 1958: arrivato a Berkeley il giorno precedente, al mattino del primo gennaio, anche se giorno festivo, mi recai all'Università della California, dove -entrato nell'istituto di chimica- ebbi il piacere di stringere la mano del mio nuovo maestro, il Professor Kenneth S. Pitzer. Utilizzai per la prima volta un calcolatore per lo studio di molecole di atomi carbonio: un IBM-650 del centro di calcolo dell'*Atomic Energy Commission*, comodamente situato sul colle sovrastante l'istituto di chimica.

Nell'estate del 1959, Pitzer mi inviò ad un congresso a Boulder in Colorado: non sapevamo che sarebbe divenuto un *landmark* della chimica teorica e computazionale. Al congresso incontrai per la prima volta molti personaggi importanti, come Robert Mulliken, per me l'eroe numero uno, ed uno studente di Clemens Roothaan, Douglas McLean, che in seguito diventò uno dei pilastri del mio fu-

turo gruppo all'IBM di San Jose. La presentazione del mio lavoro sulla molecola C_2 piacque a Mulliken che mi invitò a Chicago, come suo post-doctor. Felice ed eccitato accettai e promisi di arrivare a Chicago entro un mese, dimenticando di aver già accettato la permanenza a Berkeley per ancora sei mesi. Entro un mese, alla fine dell'estate 1959, ero nel famoso "*Laboratory of Molecular Structure and Spectra*," LMSS, dell'Università di Chicago con il Professor Mulliken.

Arrivai a Chicago quando il gruppo di Mulliken era probabilmente nel periodo di massimo splendore, unendo in modo eccezionale la chimica teorica con il calcolo elettronico. Roothaan (Olanda), McLean (Australia), Yoshimine (Giappone), Fraga (Spagna), Moccia (Italia), Weiss (USA), Huzinaga (Giappone), Malli (India) e Kolos (Polonia) erano maestri impareggiabili nell'arte di utilizzare il calcolatore, un UNIVAC 113A che si trovava al *White Field Patterson Air Force Base* in Dayton, Ohio. A quei tempi capitava spesso che si dovessero fare viaggi anche lunghi per poter accedere ad un calcolatore. Per me era anche arrivato il tempo di trovarmi una sede di lavoro fissa e stabile. Mi si presentarono tre possibilità: l'offerta dal Nobel Gerald Herzberg in Ottawa, Canada, una seconda nel gruppo di biofisica del Professor Borsellino all'Università di Genova, in Italia, la terza, una vecchia offerta di lavoro in un embrionico laboratorio della Research Division dell'IBM, situato a San Jose in California, dove un anno prima avevo dato un seminario con titolo

“Grandi Calcolatori e piccole molecole”. Accettai quest’ultima, dato che mi avrebbe garantito facile accesso a grossi calcolatori, una condizione essenziale per realizzare il mio piano di ricerca.

Gli studi a Tallahassee, Berkeley e Chicago avevano maturato in me un piano d’azione: innanzitutto fare conoscere alla comunità tecnico-scientifica l’importanza dell’uso dei calcolatori elettronici e relativi modelli di calcolo, e contemporaneamente cimentarmi a risolvere con il calcolo elettronico problemi all’inizio “semplici” ma poi sempre “più complessi”, iniziando con il mondo della chimica-fisica e poi passando anche a problemi sociali.

Ero convinto che per diffondere le nuove metodologie sarebbe stato essenziale a) offrire gratuitamente ad Università e centri di ricerca codici di programmi di calcolo, con piena documentazione e con esempi di input-output, b) offrire a selezionati giovani studiosi di qualsiasi nazione prolungati soggiorni come *post-doctorals* presso il laboratorio IBM dove lavoravo. Questo piano, da un lato facilitava nuovi contatti di mercato tra l’IBM ed il mondo accademico, dall’altro assicurava a me una notevole libertà di ricerca.

A San Jose, da *staff member* passai velocemente a *group leader* e poi a manager di un nuovo dipartimento denominato “*Department of Large Scale Scientific Computations*”. Nel giugno del 1968 fui eletto “IBM Fellow” ed in conformità con lo statuto della società ero libero di proseguire il mio lavoro ovunque io lo gradissi e con un supporto finan-

ziario adeguato. Decisi di rimanere a San Jose e di continuare il mio lavoro. In seguito chiesi ed ottenni di essere esonerato dai doveri di manager per potermi dedicare completamente alla mia ricerca scientifica.

Un primo grosso impegno fu la scrittura di un programma generale per il calcolo molecolare a livello Hartree-Fock per basis set gaussiane o di Slater, con la correzione relativistica ottenuta mediante il metodo perturbazionale. Questo codice, originariamente chiamato IBMOL, con relativa documentazione venne richiesto e distribuito gratis a circa duecento centri universitari o di ricerca. Automatico fu pure un piano di distribuzione delle revisioni, correzioni ed estensioni al codice. Seguirono molte pubblicazioni di calcoli molecolari che dimostravano come la chimica computazionale stesse diventando una realtà.

Quando nel 1966 ritornai a Chicago come *visiting professor*, in un anno sabbatico dall’IBM, studiai reazioni chimiche non con il metodo semi-empirico tradizionalmente usato, detto *Valence Bond*, ma con un mio nuovo approccio che venne denominato “Approccio supermolecolare”: anziché una molecola alla volta, tutte le molecole partecipanti alla reazione erano prese in considerazione simultaneamente. Simulai la reazione di una molecola di ammoniaca con una di acido cloridrico. I risultati numerici furono convalidati anni dopo da dati sperimentali. Le variazioni della densità elettronica vennero graficamente riprodotte in un filmato, che di-

venne molto popolare, tanto da essere pubblicizzato anche nella stampa giornalistica, per esempio nel New York Times e nella rivista Time.

Alla fine degli anni sessanta, l'IBM era preoccupata per problemi legali che la obbligarono alla separazione delle vendite hardware da quelle software. Fu così che la compagnia diminuì il suo interesse nella produzione di calcolatori scientifici per concentrarsi su quelli commerciali. Decise anche di cancellare la costruzione di un innovativo e veloce calcolatore scientifico già quasi pronto ad andare in produzione; le previsioni di mercato avevano stabilito che le spese di sviluppo sarebbero state pareggiate solo con la vendita di almeno 19 macchine. Sorpreso e deluso per la ventilata cancellazione, inviai una lettera al Chairman della compagnia, Thomas J. Watson, chiedendogli "Perché dobbiamo essere secondi?". Dopo pochi giorni fui convocato ad Armonk, *headquarter* dell'IBM, per presentare le mie opinioni al "*Corporate Technical Committee*". Enfatizzai che la costruzione di quel calcolatore doveva essere portata a termine perché importante per il progresso scientifico dell'umanità; va notato che la notte precedente un uomo aveva fatto i primi passi sulla luna. La macchina, l'IBM-195, fu costruita e il primo esemplare fu assegnato a San Jose, ma l'IBM riuscì a vendere solo 17 esemplari.

Alla fine del 1974 mi ritirai dall'IBM per ritornare in Italia, avendo ricevuto dalla Società Montedison un'interessante offerta che mi permetteva di essere

manager di un nuovo gruppo di ricercatori all'istituto di ricerca Guido Donegani con sede a Novara (1974-1979).

A quei tempi, la Società Montedison con due importanti industrie farmaceutiche, la Carlo Erba e la Farmitalia, in seguito inglobate, rappresentava la chimica fine in Italia. Pertanto, mi fu naturale indirizzare la ricerca del gruppo, chiamato Dipartimento di Calcolo Chimico, verso tematiche di biochimica. E' in questo periodo che fu completato uno studio sulla catalisi Ziegler-Natta in collaborazione con Octavio Novarro e Carlos Bunge della UNAM a Città del Messico, dove trascorsi alcuni mesi.

Un po' alla volta cominciavo a rendermi conto che il modo aperto, anche se molto competitivo, di operare in USA era di gran lunga superiore ai compromessi, lentezze e personalismi tipici della ricerca in Italia. Così decisi di ritornare in USA: chiesi ed ottenni dall'IBM-USA di poter ricostruire un gruppo di ricerca, questa volta nello stato di New York, lungo le sponde dell'Hudson, prima a Poughkeepsie (1979-1984) e poi a Kingston (1984-1991). In quel periodo, due distinte offerte per una cattedra di chimica teorica, una all'Università di Pisa e la seconda all'Università di Roma, furono rifiutate perché avevo già accettato altri impegni.

Negli anni ottanta l'industria elettronica aveva spinto al limite la tecnologia per produrre *microchips*; allo stesso tempo molti problemi di grande rilevanza scientifica e sociale, data la loro comples-

sità numerica, rimanevano non risolti. Così, utenti insoddisfatti iniziarono a cercare alternative nella costruzione di elaboratori elettronici. In alcuni centri universitari prese piede l'idea di costruire calcolatori capaci di eseguire contemporaneamente più di una operazione logica o numerica, cioè non più calcolatori *scalari* (una operazione alla volta) ma calcolatori *paralleli* (molteplici operazioni allo stesso tempo).

Anch'io ero interessato: era evidente che i codici di quanto-meccanica, per atomi e molecole, e quelli per simulazioni di Monte Carlo e dinamica molecolare potevano essere adattati facilmente ad elaboratori con architettura parallela, riducendo notevolmente i tempi di esecuzione.

Avevo un problema: il mio gruppo era privo di specialisti in hardware ed era relativamente poco numeroso. Nel 1983 misi in connessione un *array processor*, FPS-164, con un calcolatore IBM-4341. Nel giro di pochi mesi, gli array processors divennero tre, e sei nel 1984. La comunicazione fra le macchine avveniva in modo equivalente a quanto avviene in un sistema telefonico, dove N telefoni "*slaves*" possono collegarsi ad un centralino telefonico "*master*", che regola il traffico, assegna compiti e riceve messaggi dagli "*slaves*". Gli *slaves* potevano comunicare tra di loro in modo limitato, per cui la comunicazione era non stretta e serrata ma debole e limitata, una comunicazione "*loose*". Per questo motivo il sistema fu chiamato LCAP, cioè *Loosely Coupled Array of Processors*. Il sistema, ampliato a

10 processori FPS, fu migliorato con l'aggiunta di un *bus* e di una *mass memory* condivisa da tutti i processori. Costruimmo tre modelli, LCAP1, LCAP2 e LCAP3. In breve tempo adattammo alla nuova macchina tutti i nostri programmi di chimica computazionale. *Benchmarks*, eseguiti su vari tipi di codice, mostrarono che LCAP superava in velocità i calcolatori CRAY e CDC, i *super-computers* di allora. Il nostro calcolatore, data la sua semplicità ed efficienza, fu "imitato" dal centro di ricerche dell'IBM-Italia a Roma, dalla Università di Cornell, Ithaca, N.Y., dal CERN a Ginevra. Il Dr. Roald Z. Sagdev, allora direttore del centro spaziale dell'USSR Academy of Science, assemblò un calcolatore seguendo il nostro modello; collaborammo nella messa a punto del suo software e per questo inviai a Mosca il mio collaboratore Dr. J. Dietrich, anche se nel pieno della guerra fredda.

A metà degli anni ottanta, misi a punto una metodologia designata "Global Simulation", riportata in esteso nelle due serie di volumi MOTTECC (Modern Techniques in Computational Chemistry) e, anni dopo, METECC (Methods and Techniques in Computational Chemistry). Questi volumi includevano codici per il calcolo, con documentazione ed esempi di input/output, per atomi e molecole, per modelli tipo Hartree-Fock, non relativistico e relativistico, funzionali della densità, interazione di configurazione, CAS-SCF, Hylleraas CI, Monte Carlo, dinamica molecolare, fluido dinamica, micro dinamica e programmi per grafica.

Purtroppo, nel 1991, il top management dell'IBM decise di smobilitare il suo enorme numero di dipendenti: in poco tempo circa 200 mila impiegati vennero o licenziati o pre-pensionati. Mi fu offerto un trasferimento all'IBM-Italia, dove rimasi per pochi mesi, in tempo per avviare un nuovo centro di ricerca in Sardegna, il CRS4, Centro Ricerche e Sviluppo Studi Superiori Sardegna, in seguito presieduto dal Nobel Carlo Rubbia.

Lasciai l'IBM-Italia per assumere due incarichi simultaneamente, uno all'Università Pasteur a Strasburgo, invitato dal Nobel Jean-Marie Lehn ed il secondo al CRS4. Nel 1998, l'Università di Namur, Belgio, mi onorò del titolo Doctor Honoris Causa con il Professor Jean-Marie André come padrino. Era tipico della mia ricerca indirizzare i miei studi personali iniziando con sistemi semplici, gli atomi, per poi arrivare a sistemi sempre più complessi.

La materia, sia inorganica che organica, è composta da aggregazioni di atomi. A Chicago avevo avuto l'opportunità di studiare ed utilizzare un programma atomico Hartree-Fock scritto da Roothaan e collaboratori. Premetto che negli anni sessanta il calcolo Hartree-Fock per un singolo atomo era ritenuto un risultato adeguato per una pubblicazione in prestigiose riviste scientifiche. Anche per dimostrare il potere dei calcolatori elettronici, decisi di pubblicare decine e decine di calcoli atomici in una stessa pubblicazione. A San Jose continuai con calcoli sistematici per energia e funzione d'onda di atomi ed ioni. Energie e funzioni d'onda atomiche

furono inizialmente raccolte in un volume, *Tables of Atomic Functions*, pubblicato nell'IBM Journal of Research and Development. Una nuova versione, ampliata a stati eccitati e serie iso-elettroniche, scritta in collaborazione con la Professoressa Carla Retti, fu pubblicata nel 1974 come "Special Issue of Atomic Data and Nuclear Data Tables". Questi studi mi diedero l'opportunità di quantificare l'energia di correlazione, di calcolare l'energia relativistica e di rivedere le note regole di Slater per lo screening elettronico.

Era giunto il tempo di fare un passo in avanti, da atomi a Molecole. A Berkeley, con Pitzer, usando tecniche semi-empiriche, avevamo studiato le molecole C_2 e C_3 , note sperimentalmente, e predimmo anche l'esistenza di molecole lineari di carbonio, da C_4 a C_{17} , e di strutture molecolari chiuse ad anello. Molti anni dopo, la comunità dei chimici fu sorpresa dalla notizia che atomi di carbonio possono formare molecole sferoidali come il fullene, il C_{60} . A me il passaggio da strutture chiuse ad anello a strutture sferoidali non sembrò tanto sorprendente! *Nihil sub sole novum*.

A Chicago, nel 1966, mi concentrai su una molecola, HF. Decisi di abbandonare i canoni LCAO e di costruire innanzitutto un *basis set* sufficientemente lungo da garantire una soddisfacente rappresentazione degli atomi H e F a dissociazione, e, poi, di aggiungere funzioni di polarizzazione per entrambi gli atomi, una tecnica denominata in seguito "*balanced basis set*". Lo studio chiarì in modo

quantitativo l'importanza dell'energia di correlazione *molecolare* in rapporto alla somma delle energie di correlazione atomica degli atomi costituenti la molecola.

Pubblicai una serie di articoli con titolo generale "*Study of the electronic structure of molecules*", che riportavano calcoli sulla molecola dell'acqua, piccole molecole organiche, e molecole o ioni interagenti con acqua. A questi studi seguirono articoli riguardanti soluzioni acquose di ioni o molecole studiate con il metodo Monte Carlo di Metropolis o della dinamica molecolare. Il problema di quantificare l'energia di correlazione elettronica venne affrontato con due diversi approcci. Per molecole, proponendo una correzione direttamente nel calcolo di Hartree-Fock usando una formula empirica basata sulla densità elettronica. Questo avveniva circa dieci anni prima che la comunità della chimica computazionale usasse i funzionali della densità come superamento del metodo di Hartree-Fock. Per atomi, usai il metodo "*Complete Multi-Configuration*" proposto in collaborazione con il Prof. Alain Veillard. Il metodo, oggi, è noto con l'acronimo CAS-SCF.

Altri temi di ricerca furono la determinazione con calcoli quanto-meccanici di potenziali analitici, e loro affidabilità e trasferibilità. Con questi potenziali furono eseguite simulazioni di tipo Monte Carlo e dinamica molecolare di reazioni tra bio-molecole, di molecole in soluzione, del DNA in varie conformazioni, di enzimi e proteine in soluzione.

La curiosità di conoscere in modo pratico il limite massimo della complessità per simulazioni di grandi sistemi multi-molecolari portò al confronto tra risultati ottenuti con tecniche standard di Navier-Stokes con quelli ottenuti con metodi di microdinamica. Si presero in considerazione dei flussi, ad esempio flussi con barriere, formazione di cellule di Bernard, e simulazioni dei flussi nella baia di Buzzard a Cape Code, Massachusetts. Alcuni di questi lavori furono eseguiti in collaborazione con ricercatori del gruppo del Nobel Ilia Prigogine, che avevo incontrato durante un soggiorno all'Università Libre de Bruxelles dove tenni la serie di lezioni Chair Franquie.

Questa ricerca prevedeva futuri limiti di calcolo di grandi sistemi biologici o di modelli sociali. In questo spirito, già anni prima a Novara, avevo fatto una simulazione fluido-dinamica sull'inquinamento atmosferico della zona Venezia-Porto Marghera. I dati rilevati dalle stazioni di monitoraggio ci venivano forniti dall'Ente Zona di Venezia. I risultati, sfavorevoli per l'industria Montedison, non piacquero al top-management e potei pubblicarli solo anni dopo.

In pensione dal 2000, vivo a Como con mia moglie, la Professoressa Giorgina Corongiu, insegnante, all'Università dell'Insubria, corsi di chimica quantica e di chimica computazionale, campi nei quali ha collaborato con me sino dal 1976. E' coautrice di oltre un centinaio dei miei oltre quattrocento articoli scientifici. Buona parte del primo

anno di pensionamento l'ho trascorso a Bonn e a Garching in Germania come Von Humbolt fellow, grazie all'interessamento della Professoressa Sigrid Peyerimhoff. A Como ho frequentato l'Accademia delle Belle Arti "Guido Galli" per migliorare la tecnica di pittura ad olio, iniziata in gioventù. Nel secondo anno di corso ho trascorso tre mesi a Valencia, Spagna, come studente all'Accademia Reale delle Belle Arti "San Carlos". Ora mi occupo della revisione di un volumetto, con titolo "Dove siamo e chi siamo", pubblicato principalmente per costringermi ad aggiornarlo continuamente.

Guardando in avanti auspico, in un futuro prossimo, che la chimica computazionale, anzi, che la metodologia della "Global Simulation" si concentri su tre tematiche: ricerca per migliorare il nos-

tro ambiente, per estendere l'uso della intelligenza artificiale, e per capire i meccanismi che regolano quella attività celebrale che chiamiamo "pensiero". Purtroppo questi scenari rimarranno vuote intenzioni, a meno che la scuola si impegni ad offrire corsi di programmazione sia nelle scuole primarie che secondarie. Una nazione all'avanguardia in informatica ha ottime probabilità di emergere su tutte le altre. Vi sarà un ostacolo: la mancanza di docenti preparati.

Questi sono solo scenari per future direzioni delle scienze computazionali: è chiaro che siamo ancora ai primi passi, un cammino destinato a condurci verso un "sapere" nuovo, molto più profondo ed a molte nuove applicazioni.

Grazie per la vostra attenzione.

Discurso del Rector Magnífico
de la Universidad de Oviedo

Don Santiago García Granda



Santiago García Granda

Sr. Presidente del Gobierno del Principado de Asturias

Sr. Presidente de la Junta General del Principado

Sra. Consejera de Servicios y Derechos Sociales

Alcaldes y Alcaldesas

Dignísimas autoridades

Ex Rectores

Defensora Universitaria

Miembros del Claustro Universitario y de la Comunidad Universitaria de la Universidad de Oviedo y de otras Universidades españolas

Señoras y Señores

Inicio las palabras de bienvenida agradeciendo a todos ustedes su asistencia a este solemne acto de investidura como doctor honoris causa del profesor Enrico Clementi y dándole las gracias por aceptar integrarse en el claustro doctoral de una Universidad con la que ha venido manteniendo relaciones como consecuencia de su colaboración con miembros del departamento de Química Física y Analítica para impartir seminarios de Química Computacional.

Como acabamos de oír en su *laudatio*, el Doctor José Ángel Sordo Gonzalo ya ha puesto de relieve su excelencia investigadora, dando sobrada cuenta de la repercusión mediática internacional de sus trabajos colaborando con varios premios Nobel. Colaboró con el profesor Giulio Natta en la Escuela Politécnica de Milán analizando desde el marco de la Teoría de las Orbitales Moleculares, la conducti-

vidad eléctrica de los polímeros orgánicos. En la Universidad de California predice por primera vez, junto al prestigioso termodinámico Kenth S. Pitzer, la existencia de moléculas de carbono C_n , tanto lineales como en forma de anillo. Fue con otro Nobel, Robert S. Mulliken, donde contribuyó de manera muy activa en el desarrollo y aplicación de la teoría de los Orbitales Moleculares, en cuyo marco se ha venido desarrollando, fundamentalmente, la Química Teórica, hasta nuestros días.

Fue como profesor visitante en la Universidad de Chicago cuando Clementi publica una aportación trascendental, prediciendo la formación de cloruro armónico en fase gas. Quizá se trate de la primera predicción a partir de cálculos *ab initio* que contrariaba la evidencia experimental acumulada hasta aquellos días. Poco tiempo después se confirmaba el hallazgo del profesor Clementi. El evento causó un gran impacto en la comunidad científica y tuvo una repercusión mediática mundial de primera magnitud. Por primera vez se hizo una animación por ordenador, mostrando el transcurso de una reacción química, paso a paso, en términos de las variaciones de las densidades electrónicas de las moléculas involucradas.

Decía KIERKEGAARD –a quien el profesor Clementi acaba de citar-, que “*La vida sólo puede ser comprendida mirando hacia atrás, pero ha de ser vivida mirando hacia adelante*”. Por eso, desde su jubilación, con la vista puesta siempre hacia el horizonte, viene trabajando en la puesta a punto de una nueva meto-

dología mecano-cuántica que unifica las dos teorías generales de la Química Teórica, la teoría de los Orbitales moleculares y la del enlace de Valencia empleando el concepto de orbital químico.

No cabe duda de que la Universidad se enriquece al acoger en su selecta nómina de pensadores al profesor Enrico Clementi, pero no sería razonable no aludir brevemente a cómo es la institución académica a la que acaba de incorporarse. La Universidad de Oviedo es un emblema de la educación superior, de la investigación científica y de la difusión cultural, estando con frecuencia en el epicentro de la atención social, del debate intelectual y de las preocupaciones políticas y económicas actuales, que no son pocas. Pero pese a todo, esta universidad a la que acaba de incorporarse se reafirma como la gran esperanza de los estudiantes que ven en nosotros una posibilidad para formarse personal y profesionalmente para acceder a una vida digna y productiva, porque esta Universidad, como no podía ser de otra manera, es defensora de los principios de libertad, solidaridad, justicia y progreso.

Y es aquí, en el progreso y en el futuro, donde la investigación y la innovación son fundamentales para el desarrollo social y económico de un país, porque no olvidemos que la generación del conocimiento provoca riqueza y bienestar. Como ya señalé en la inauguración de este curso, de esto no parecen estar convencidos los mandatarios naciona-

les y regionales, que continúan empeñados en hablar de gasto presupuestario en investigación y educación, cuando en realidad deberían aludir a inversión, porque los presupuestos destinados a la ciencia y la educación tienen una amplia rentabilidad en el desarrollo económico empresarial, en el nivel de vida de la sociedad y en el bienestar ciudadano. Los recortes han situado a España como el país europeo que más ha reducido los presupuestos a la ciencia, incluso por debajo de Grecia y mientras no se acepte el concepto de que el dinero destinado a investigación y educación no es gasto, es inversión, el país no saldrá de forma satisfactoria e igualitaria de la crisis que aún nos azota.

Al comienzo de su brillante intervención, el profesor Clementi, ha confesado que no habla la lengua de Cervantes o García Lorca, pero sí la Dante y de Petrarca. Pues bien, recurriendo a este último lírico y humanista italiano, tan influyente en nuestro Garcilaso de la Vega, "*Es más honorable obtener el trono que haber nacido en él. La fortuna otorga uno, el mérito el otro*". Ese mérito, o mejor, esos grades méritos que hacen que hoy la Universidad de Oviedo incorpore a su claustro de doctores al profesor Enrico Clementi, esperando que su estancia entre nosotros sirva de estímulo para el desarrollo de la Universidad y de nuestra comunidad autónoma.

Munches gracias / Muchas gracias / Grazie mille

Discorso del Magnifico Signor Rettore
dell'Università di Oviedo

Don Santiago García Granda

Sig. Presidente del Governo del Principato delle Asturie,
Sig. Presidente della Giunta Generale del Principato delle Asturie,
Sig.ra Consigliera di Servizi e Diritti Sociali,
Sindaci,
Degnissime Autorità,
Ex Rettori,
Mediatrice Accademica,
Membri del Senato Accademico e della Comunità Universitaria dell'Università di Oviedo e di altre Università spagnole,
Signore e Signori,

Vorrei dare il benvenuto a tutti voi, ringraziando la vostra presenza in questo solenne atto di investitura come Dottore *honoris causa* del Professore Enrico Clementi ed esprimendogli la mia gratitudine ed i miei ringraziamenti per aver accettato di aderire al senato accademico di un'Università con cui ha mantenuto rapporti come risultato della sua collaborazione scientifica ed accademica con i membri del Dipartimento di Chimica Fisica e Analitica per tenere seminari di Chimica computazionale. Come abbiamo appena sentito nella sua laudazione, il Dottore José Ángel Sordo Gonzalo ha già sottolineato la sua eccellenza nella ricerca, spiegando copiosamente la ripercussione mediatica internazionale dei suoi contributi, collaborando con vari Nobel. Lavorò con il Professore Giulio Natta al Politecnico di Milano, analizzando, dal inquadramen-

to della Teoria degli Orbitali Molecolari, la conducibilità elettrica dei polimeri organici. All'Università della California predice per la prima volta, insieme al prestigioso termodinamico Kenneth S. Pitzer, l'esistenza di molecole di carbonio C_n , siano lineari che ad anello. Fu con un altro Nobel, Robert S. Mulliken, con chi contribuì attivamente nello sviluppo e nell'applicazione della Teoria degli Orbitali Molecolari, nel cui ambito è stata fondamentalmente sviluppata la Chimica teorica fino ai giorni nostri.

Essendo *Visiting Professor* all'Università di Chicago, Clementi pubblicò un contributo essenziale, prevedendo la formazione di cloruro ammonico in fase gassosa. È forse la prima previsione a partire da calcoli *ab initio* che contraddiceva le prove sperimentali accumulate fino a quel tempo. Poco tempo dopo la scoperta del Professore Clementi fu confermata sperimentalmente. L'evento causò un grande impatto nella comunità scientifica ed ebbe una ripercussione mediatica globale di primaria importanza. Per la prima volta si fece un'animazione generata con il computer che mostrava il decorso di una reazione chimica, passo dopo passo, in termini di variazioni delle densità elettroniche delle molecole coinvolte.

Kierkegaard — il quale il Professore Clementi ha appena citato — diceva che «la vita può essere capita solo guardando indietro, ma deve essere vissuta guardando avanti». Ecco perché, dal suo pensionamento, tenendo sempre lo sguardo puntato all'orizzonte, sta

lavorando alla messa a punto di una nuova metodologia mecano-quantica che unifica le due teorie generali della Chimica teorica, la Teoria degli Orbitali Molecolari e quella del Legame di Valenza, utilizzando il concetto di «Orbitale Chimico».

Non c'è dubbio che l'Università si stia arricchendo con l'accoglienza del Professore Enrico Clementi nella sua lista selettiva di dottori, ma non sarebbe ragionevole non fare un breve riferimento all'istituzione accademica a cui ha appena aderito. L'Università di Oviedo è un emblema dell'istruzione superiore, della ricerca scientifica e della diffusione culturale, trovandosi spesso nell'epicentro dell'attenzione sociale, del dibattito intellettuale e delle preoccupazioni politiche ed economiche attuali — che non sono poche —. Comunque, malgrado tutto, quest'Università di cui è appena entrato a far parte si riafferma come la grande speranza degli studenti che vedono in noi la possibilità di istruirsi a livello sia personale che professionale per accedere ad una vita dignitosa e produttiva, poiché quest'Università, non poteva essere altrimenti, è sostenitrice dei principi di libertà, di solidarietà, di giustizia e di progresso.

Ed è qui, nel progresso e nel futuro, dove la ricerca e l'innovazione sono fondamentali per lo sviluppo sociale ed economico di un paese, senza dimenticare che la generazione della conoscenza produce ricchezza e benessere. Come già sottolineai all'inaugurazione di quest'anno accademico, di ciò non

sembrano essere convinti i governanti nazionali e regionali, i quali continuano a parlare di spese di bilancio per la ricerca e l'istruzione, quando in realtà dovrebbero alludere all'investimento, dato che i bilanci per la scienza e l'istruzione hanno un'ampia redditività nello sviluppo economico imprenditoriale, nel livello di vita della società e nel benessere dei cittadini. I tagli economici hanno reso la Spagna la nazione europea che più ha ridotto il proprio bilancio per la scienza, addirittura al di sotto della Grecia; tuttavia, finché non si consideri che i soldi destinati alla ricerca ed all'istruzione non sono una spesa, ma un investimento, questo paese non uscirà in modo soddisfacente ed egualitario dalla crisi che ci colpisce ancora.

All'inizio del suo brillante intervento, il Professore Clementi, ha confessato che non parla la lingua di Cervantes e García Lorca, ma sì quella di Dante e Petrarca. Ebbene, ricorrendo a quest'ultimo poeta ed umanista italiano, così influente nel nostro Garcilaso de la Vega, «è più onorevole ottenere il trono di essere nato in esso. La fortuna ne concede uno, il merito ne dà l'altro». Questo merito, anzi, quei grandi meriti oggi fanno che l'Università di Oviedo aderisca il Professore Enrico Clementi al suo senato accademico, sperando che il suo soggiorno qui con noi serva di stimolo per lo sviluppo dell'Università e della nostra comunità autonoma.

Munches gracias / Muchas gracias / Grazie mille

DOCTORES Y DOCTORAS HONORIS CAUSA
investidos por la Universidad de Oviedo (1960-2017)

Excmos. Sres. y Excmas. Sras.

1960

D. José Ibáñez Martín

1967

D. Severo Ochoa Albornoz (Ciencias)

1968

D. Walter Hallstein (Derecho)

1972

D. Carlos Prieto Fernández de la Llana
(Derecho)

1976

D. Claudio Sánchez Albornoz
(Filosofía y Letras)

1977

D. Helmut Schlunk (Filosofía y Letras)

1979

D. Guillermo Soberón (Ciencias)
D. Valentín Andrés Álvarez (Economía)
D. Daniel Strasser (Economía)

1981

D. Juan Velarde Fuentes (Economía)
D. Julio Rodríguez Villanueva (Ciencias)
D. Rodrigo Uría González (Derecho)
D. Francisco Grande Covián (Medicina)

1982

D. Ramón Areces Rodríguez (Economía)
D. Gonzalo Anes Álvarez (Economía)
D. Gunter Wilke (Química)
D. Antonio González González (Química)

1985

D. Rafael Lapesa Melgar (Filología)
D. Manuel Laínz Gallo (Biología)

1988

D. Óscar Arias Sánchez (Economía)

1990

D. Marino Yela Granizo (Filosofía/Psicología)

1991

D. Enrique Fuentes Quintana (Económicas)
D. Federico Mayor Zaragoza (Medicina)

1992

D. Francisco Rubio Llorente (Derecho)
D. William Golding (Filología)

1994

D. Ignacio Herrero Garralda (Economía)
D. Aurelio Menéndez Menéndez (Derecho)
D. Nicolás Sánchez- Albornoz (Economía)
D. José Luis García Delgado (Economía)
D. Álvaro Cuervo García (Economía)

1995

D. Julio Segura Sánchez (Economía)
D. José Luís Pinillos Díaz (Psicología)
D. Lofti A. Zadeh (Ciencias)

1996

Dña. Margarita Salas Falgueras (Medicina)
D. Eduardo García de Enterría (Derecho)
D. Stanley H. Langer (Química)
D. Víctor Sánchez (Química)

1997

D. Manuel Albaladejo García (Derecho)

1998

D. Abraham Clearfield (Química)
Dña. Sheila Sherlock (Medicina)
D. Antonio García-Bellido (Biología)

1999

D. Enrique Castillo Ron (Ingeniería)

2000

D. Sixto Ríos García (Ciencias)

2001

D. Julio Diego González Campos (Derecho)
D. Gil Carlos Rodríguez Iglesias (Derecho)

2002

D. Enrique Valentín Iglesias García (Economía)
D. Ronald K. Hambleton (Psicología)
D. Eloy Benito Ruano (Historia)

2007

D. Ángel González Muñiz (Filología)
D. Juan José Millás García (Filología)

2008

D. Rafael Calvo Ortega (Derecho)
D. José Delgado Pinto (Derecho)
D. Antonio Martín Valverde (Derecho)
D. Walter Álvarez (Geología)
D. Efim I. Zelmanov (Matemáticas)
D. Juan Rodés Teixidor (Medicina)

2009

D. José Elguero (Química)
D. Ulrich Hauptmans (Química)
D. José Manuel Esteve Zarazaga
(Ciencias de la Educación)

2010

D. Andrej Karbownik (Ingeniería de Minas)
D. Paul Younger (Ingeniería de Minas)
D. Juan Carlos Torres Inclán (Ingeniería de Minas)

2012

D. José Francisco Cosmen Adelaida (Economía)

2014

D. John Rutherford (Filosofía y Letras)

2015

D. Francisco Rodríguez García (Química)
D. Juan Luis Vázquez Suárez (Matemáticas)

2017

D. Francesco Tonucci, "Frato" (CC. de la Educación)
D. Alessandro Pace (Derecho)
D. James C.M. Chan (Medicina)
D. Enrico Clementi (Química)

