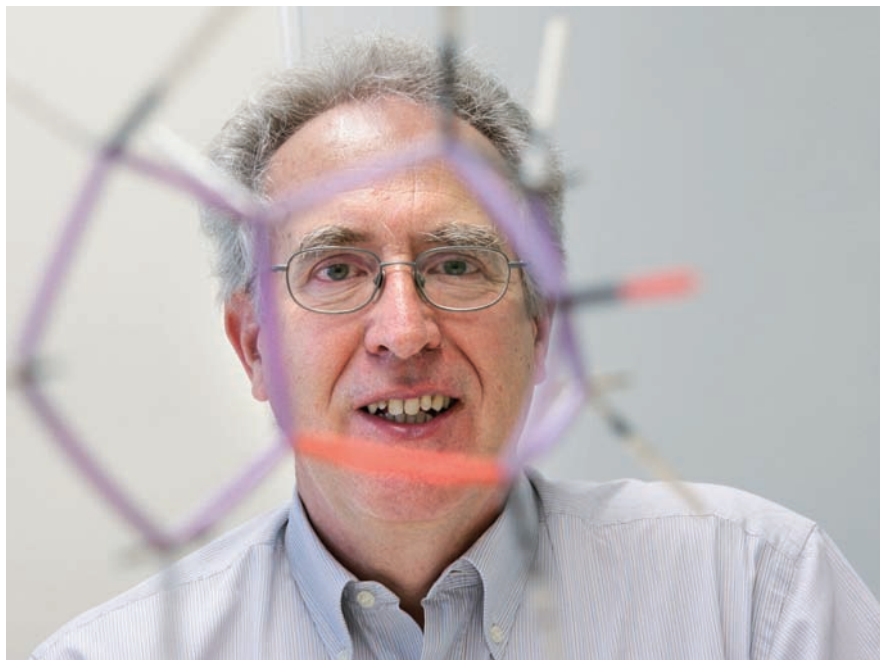


“La xarxa de recerca en química teòrica ha fet de pal de paller per als químics teòrics catalans”

FOTOS: JORDI PARETO



A la fi de 1969, ara fa 40 anys, Santiago Olivella va tenir el seu “bateig de foc” en la Química teòrica computacional amb uns càlculs quàntics que va poder fer gràcies al fet que “el Dr. Ramon Carbó em va deixar usar el codi HMO que havia programat en Fortran IV per a un petit ordinador IBM 1130 de l’IQS”, explica Olivella. En la seva carrera, l’estada postdoctoral en el grup de Michael Dewar, a la University of Texas at Austin (EUA), va ser “decisiva”. Allà va descobrir que “la química teòrica i computacional podia ser una eina molt potent per investigar l’estructura i la reactivitat de les molècules” i d’allà va tornar amb una cinta magnètica amb programes de càlcul teòric semiempíric. Així va començar una tasca d’implementació d’aquests programes, uns inicis de “molta feina i de poc suc”, i també de formació d’estudiants de doctorat al llarg de 22 anys. El 1985, amb els professors Joan Bertran i Ramon Carbó, va crear l’actual Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya (XRQTC), que “ha fet de pal de paller per a tots els grups de recerca en química teòrica que han anat sorgint al llarg dels anys a les diferents universitats catalanes”. Amb motiu dels 65 anys del professor Olivella, els seus col·legues de l’XRQTC l’han homenatjat en la 25a reunió d’aquesta xarxa “com a reconeixement als seus esforços i dedicació”.

El 1968, fa prop de 40 anys, va acabar la carrera en Química, just dos anys després que Robert Mulliken, en rebre el premi Nobel de Química el 1966, profetitzés que l’avanç dels ordinadors transformaria la química teòrica i computacional en una eina quasi tan indispensable com el treball experimental. Què ha estat per a vostè, que ha viscut aquesta evolució, allò que més l’ha impressionat?

El que més m’ha impressionat és l’espectacular creixement de la velocitat de càlcul i l’extraordinària capacitat d’emmagatzematge de dades que han experimentat els ordinadors. Cal tenir en compte que jo pertanyo a la generació dels químics teòrics que va començar a fer càlculs químic-quàntics emprant les fitxes perforades, tant per carregar el codi a l’ordinador com per entrar-hi les dades del càlcul. La gran potèn-

cia de càlcul dels ordinadors actuals ha fet possible que es complís amb escreix la predicció de Robert Mulliken. Només cal adonar-se de la gran diversificació de les aplicacions de la química teòrica i computacional en diferents àmbits de la recerca, com són la ciència de materials, el disseny de fàrmacs, la química atmosfèrica, la catàlisi enzimàtica, el disseny de nous catalitzadors, la dinàmica de reaccions, etc.

Com es va viure aquesta predicció en el seu entorn?

Cal tenir present que Robert Mulliken era físic, no químic. Pensar que els químics poguéssim fer càlculs del nostre interès usant la mecànica quàntica, el que en diem química quàntica, semblava una quimera. En primer lloc, perquè els sistemes a tractar, que tenen un interès real, són sistemes molt grans i els recursos computacionals que hi havia en aquella època eren molt rudimentaris. En aquell moment, era molt difícil albirar un futur com el que hem aconseguit recentment. Per tant, té molt de mèrit la predicció que va fer Mulliken en una època en què hi havien pocs ordinadors i en què la química quàntica era pràcticament una entelèquia. Mulliken va saber veure-hi el futur que tenia com a eina potent i pràctica.

Què el va portar a seguir els estudis en Química?

Amb 12 o 13 anys ja anava a les drogueries del barri i a les cases de material de laboratori per comprar-me productes químics i balons, matrassos, cubetes... A casa, en un petit safareig tancat a la galeria, havia muntat un laboratori i feia els meus experiments seguint un llibre de química que m’havia regalat el meu pare. Ja de ben jove la química tenia un gran atractiu per a mi, tots els diners que recollia me’ls gastava en productes químics i en material de laboratori. De tant en tant, hi havia algun petit ensurt a casa, perquè alguna cosa explotava i els meus germans i els meus pares venien corrent a veure si havia pres mal.

Abans de començar la carrera, dubtava si fer la llicenciatura en Química o en Física, perquè veritablement la física sempre m’ha agradat molt. En aquella època, el primer any de carrera era un curs selectiu comú per a totes les llicenciatures de ciències que contenia diverses assignatures generals, química, física, matemàtiques... i va ser decisiva la impressió que em va causar el professor de Química, el

Dr. Josep Pascual Vila, creador de l'escola de química orgànica de Barcelona. Malgrat era el seu últim any com a docent, ja que es jubilava a l'any següent, el professor Pascual va saber transmetre'ns el seu entusiasme per la recerca en química, i això va ser decisiu en mi. De tota manera, vaig continuar estudiant física també, perquè seguia tenint molt d'interès per a mi. D'alguna manera, ja estava força inclinat cap a la química teòrica, que en el fons és una barreja entre la química i la física.

Com va arribar a la química quàntica un cop va acabar la carrera en Química?

Quan vaig estudiar la llicenciatura en Química a la Universitat de Barcelona (UB) no hi havia cap assignatura de química quàntica. Per tant, un cop acabada la carrera i començada la tesi doctoral, em vaig introduir en la química quàntica de forma autodidacta, fent servir llibres de text clàssics en anglès, com ara els Coulson, Pauling, Eyring, Walter and Kimball, etc. que vaig trobar a la Biblioteca de Catalunya, l'antiga Biblioteca Central, i també d'altres de més moderns que vaig comprar a la llibreria Blackwell de Londres.

A la fi de 1969 vaig tenir la immensa sort de conèixer el Dr. Ramon Carbó, que acabava de tornar d'una estada postdoctoral en el grup de química quàntica del professor Serafín Fraga, a la Universitat d'Alberta, al Canada, que era, per cert, un dels deixebles d'en Robert Mulliken. El Dr. Carbó es va incorporar a l'Institut Químic de Sarrià (IQS) com a professor d'àlgebra lineal i va continuar fent la seva recerca en el camp de la química quàntica. A més de deixar-me els seus llibres de química quàntica, el Dr. Carbó em va deixar emprar el codi HMO que ell havia programat en Fortran IV per a un petit ordinador IBM 1130 de l'IQS per fer càlculs basats en el mètode de Huckel per a sistemes amb electrons π . Aquests primers càlculs quàntics van ser el meu bateig de foc en el camp de la química teòrica computacional.

L'any 1973, va marxar a França per fer una estada postdoctoral al Laboratoire de Chimie Organique Physique du Centre d'Études Nucleaires de Grenoble (CENG). Quins records té d'aquells anys de finals de la dictadura a Grenoble?

Només vaig estar tres mesos en el grup de recerca del professor André Rassat, al CENG, però recorde l'agradable sensació de llibertat que es respirava a França i que contrastava fortament amb l'atmosfera tancada i repressora de la dictadura franquista

que hi havia a tot l'Estat espanyol. Des del punt de vista científic, em va impressionar molt el fet de participar en un grup de recerca format per químics experimentals i químics teòrics. Això permetia treballar en temes molt interessants que difícilment s'haguessin pogut tirar endavant sense una estreta col·laboració entre els químics experimentals i els teòrics.

El seu segon postdoctorat va ser als EUA, a Austin, en el grup de Michael J. S. Dewar. Com van ser aquells anys als EUA i com van contribuir en la seva trajectòria professional?

“El gran nombre d'articles publicats pels químics teòrics catalans avala el nivell de la seva recerca”

Aquells dos anys i escaig d'estada postdoctoral als EUA en el grup de recerca del professor Dewar van ser extraordinàriament feliços i fructífers, tant des del punt de vista científic com personal. En gran part, va ser a causa de viure en una societat amb una forma de pensar i de fer molt diferent a la que jo estava acostumat. Allí, la Maria Àngels, la meva dona, i jo vam fer moltes amistats que avui dia encara perduren.

En la meva trajectòria professional, la contribució d'aquesta estada postdoctoral va ser decisiva. Vaig descobrir que la química teòrica i computacional podia ser una eina molt potent per investigar l'estructura i la reactivitat de les molècules. Era l'època dels anomenats “mètodes semiempírics d'orbitals moleculars” (MINDO/2, MINDO/3, MNDO...), que van obrir als químics quàntics les portes a l'exploració de les superfícies d'energia potencial de reaccions d'interès químic real, cosa que permetia esbrinar el seu mecanisme.

Fins aleshores, la recerca en química quàntica s'havia mantingut en un terreny molt acadèmic i amb unes aplicacions molt limitades. Mercès a l'augment de la potència de càlcul dels ordinadors i a l'avenç en la programació d'algorismes de càlcul numèric eficients, els anomenats mètodes *ab initio* també van començar a ser emprats per estudiar reaccions químiques amb un nombre petit d'àtoms. Tot plegat em va fer decidir a dedicar-me professionalment a

l'estudi computacional de les reaccions químiques basat en els mètodes de la química teòrica.

Un cop va tornar a Catalunya, com era la recerca en química teòrica que s'hi feia? Quines diferències hi havia aleshores amb el que havia conegut fora?

Quan vaig tornar dels EUA, la recerca en química teòrica que es feia a Catalunya bàsicament era la que realitzava el professor Carbó a l'IQS, el professor Bertran a la Universitat Autònoma de Barcelona i els estudiants del Dr. Tel a la UB. Els recursos de càlcul eren raquífics. Excepte el grup del professor Carbó, que disposava d'un ordinador a l'IQS, els altres grups de recerca havíem de realitzar els càlculs teòrics en l'ordinador FACOM de la Universitat Politècnica de Catalunya o bé en l'ordinador UNIVAC 1108 del Centro de Proceso de Datos del llavors Ministerio de Educación y Ciencia, ubicat a Madrid.

Tant el codi com les dades dels càlculs s'introduïen als ordinadors amb una lectora de fitxes perforades. En el cas de l'UNIVAC, la lectora de fitxes enviava les dades a Madrid a través d'una línia telefònica de mala qualitat que s'espallava cada dos per tres. Aconseguir que acabés amb èxit el càlcul d'optimització de la geometria d'una molècula no gaire gran amb un mètode semiempíric era una tasca molt llarga, laboriosa i extenuant. Atès que jo venia de treballar amb l'ordinador CDC 6600-6400 de la Universitat de Texas a Austin, un dels més potents que hi havia en aquella època als EUA, el xoc amb la manca de recursos computacionals que hi havia a Catalunya va ser brutal. Realment calia tenir molta paciència i voluntat per voler-se dedicar a la química teòrica i computacional en el nostre país en aquella època!

Quin any es va incorporar al Consell Superior d'Investigacions Científiques (CSIC)?

Abans de marxar als EUA, ja havia aconseguit una plaça de col·laborador científic del CSIC, així que vaig fer el postdoctorat amb un permís especial que em va concedir el CSIC perquè em desplaçés als EUA per treballar en el grup del professor Dewar. Sabia que a la meva tornada tenia una plaça assegurada com a col·laborador científic, però no tenia clar en quin camp de la química treballaria. Quan vaig tornar dels EUA, ja ho tenia molt clar.

Va ser important el que vaig portar d'EUA el novembre de 1976: una cinta magnètica amb els programes de càlcul que teníem al grup del professor Dewar. En



Es va llicenciar en Química a la UB el 1968, i va doctorar-se el 1973 amb la màxima qualificació amb una tesi sobre radicals lliures en química orgànica. Aquests estudis el van introduir a la química quàntica i va començar com a postdoctoral al Laboratoire de Chimie Organique Physique du Centre d'Etudes Nucleaires du Gre-

noble, l'any 1973 en el grup del professor André Rassat. De 1974 a 1976, va fer una segona estada postdoctoral a la University of Texas a Austin, en el grup del professor Michael Dewar. Des de 1988, Olivella és professor d'investigació del CSIC, i ha estat un dels professors catalans en química teòrica pioners en ensenyar i en promoure els conceptes i les eines de la química quàntica tant entre la comunitat química teòrica i altres químics d'altres àrees, com ara l'orgànica, la inorgànica i la bioquímica. De 1981 a 2000, va ser professor convidat a la UB on ha estat cofundador i el primer director de Centre Especial de Recerca en Química Teòrica (1998-2000). A la fi de l'any 2000, va tornar al CSIC on lidera el grup de Química Teòrica i Computacional a l'Institut de

Química Avançada de Catalunya. Guardonat amb la medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic de la Generalitat de Catalunya (1999) i amb el premi Solvay per a la recerca en ciències químiques (2003), és acadèmic electe de la Reial Acadèmia de Ciències i Arts de Barcelona des de 2007. Autor de nombroses contribucions en el camp de la química quàntica, tant pel que fa a models teòrics a estructura i mecanismes de reacció en química orgànica. Ha contribuït al desenvolupament i a la implementació del codi MOPAC, un dels paquets més àmpliament usats a la química computacional i que va permetre a molts investigadors joves usar aquesta eina computacional per tractar diferents problemes químics des del principi dels 80.

aquell moment, la majoria d'aquests programes no estaven implementats en lloc més que en aquell grup. Amb moltes penes, treballs i sacrificis vaig aconseguir implementar-los aquí. El primer problema va ser trobar una lectora de cintes compatible, buscar en quins ordinadors es podria instal·lar aquest programari, que van ser el FACOM, l'UNIVAC... Per tant, els inicis van ser de molta feina i de poc suc, ja que abans de poder treure una publicació passaves molt de temps implementant i provant els programes.

Una de les seves contribucions és la creació l'any 1985 de la Xarxa Catalana de Química Teòrica i Computacional (vegeu *Teraflop 68*), juntament amb els professors Joan Bertran (vegeu *Teraflop 60*) i Ramon Carbó (vegeu *Teraflop 68*). Quina ha estat l'aportació d'aquesta xarxa a la recerca en química teòrica a Catalunya?

La creació l'any 1985 del Grup de Química Quàntica de l'IEC, el nom que tenia inicialment, que passaria l'any 1994 a ser la Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya, és a dir, una xarxa temàtica de la Generalitat de Catalunya, i que finalment l'any 2006 es va convertir en la Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya ha tingut un paper fonamental en la promoció de la recerca d'excel·lència en Química Teòrica i Computacional a Catalunya. És innegable que la recerca en aquest camp en el nostre país ha assolit un nivell de qualitat i reconeixement internacional molt alt. Aquesta afirmació l'avalua el gran nombre d'articles publicats pels químics

teòrics catalans en les millors revistes científiques internacionals i la creixent participació com a conferenciants invitats d'aquests científics en congressos internacionals de gran prestigi.

La xarxa ha fet una mica de pal de paller per a tots els grups de recerca en química teòrica que han anat sorgint al llarg dels anys a les diferents universitats catalanes. Ha estat el nexa comú per a tots aquests grups, per poder intercanviar coneixement, per esperonar la gent jove a presentar els seus treballs directament en congressos i reunions, i també per solucionar problemes de programari i de supercomputació com si fossim un sol grup.

Aquesta tasca formadora i esperonadora de la gent jove ha estat una activitat important en la seva carrera professional.

Efectivament. Durant 22 anys vaig estar donant un curs de doctorat a la UB, abans fins i tot de ser professor visitant en aquesta universitat. Just després de la meua tornada dels EUA, el professor Josep Castells, catedràtic de Química Orgànica de la UB, es va interessar en que jo, malgrat estés al CSIC, pogués impartir un curs de doctorat que introduís tots els estudiants de doctorat de química en el càlcul teòric. El professor Castells era molt conscient de la importància que tindria la química teòrica i computacional, no solament en el Dept. de Química Física sinó també en el de Química Orgànica.

A part de mantenir el programari, vaig fer la tasca de distribuir-lo i donar-lo a conèi-

xer. Una activitat que va contribuir a fer augmentar espectacularment el nombre de tesis doctorals de química experimental que incloïen també càlculs teòrics. Evidentment, van ser molt importants també en aquest punt les contribucions dels professors Carbó i Bertran.

Des del propi CESCA, hem pogut veure el creixement de la comunitat de químics teòrics a Catalunya, que històricament han estat grans usuaris dels serveis de càlcul del Centre. Com a usuari i com a membre de la Comissió de Grans Usuaris de Supercomputació, com ha contribuït el CESCA en la seva tasca investigadora?

Estic totalment convençut de que el CESCA ha contribuït en gran mesura a la meua tasca investigadora des de la seva creació l'any 1991. Molts dels càlculs en què es fonamenten la majoria dels articles que he publicat aquests darrers anys s'han pogut realitzar mercès al maquinari del CESCA i al suport tècnic que sempre he rebut per part del seu personal.

A banda de facilitar la supercomputació als usuaris de química teòrica, el CESCA també ha fet una gran tasca a través de l'organització de *workshops*, seminaris, la Jornada Catalana de Supercomputació, la pròpia revista *Teraflop...* Són valors afegits que han ajudat els químics teòrics, en particular, però en general a tota la comunitat científica. El CESCA no és solament un centre de supercomputació, sinó que ha dinamitzat també tot una sèrie d'aspectes relacionats amb la supercomputació, la recerca, la formació, etc. ■