



“Contínuament apareixen nous desafiaments en els quals la química és clau”

ENTREVISTA A FELIU MASERAS, PREMI QUÍMICA FÍSICA RSEQ 2011

El doctor Feliu Maseras porta més de 20 anys dedicant-se a la química computacional. Actualment treballa a l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ) liderant un grup de recerca que té per objectiu millorar l'eficiència dels processos catalítics mitjançant mètodes computacionals per aconseguir un ús més eficient dels recursos i minimitzar els residus, fent-los així més sostenibles. Enguany, i coincidint amb l'Any Internacional de la Química, ha estat distingit amb el premi Química Física de la Real Sociedad Española de Química, un reconeixement que el fa sentir orgullós i l'encoratja a seguir amb la seva recerca.

Recentment ha estat guardonat amb el Premi de Química Física atorgat per la Real Sociedad Española de Química (RSEQ). Què suposa per a vostè aquest reconeixement?

Per a mi aquest premi és un reconeixement a la feina atorgat per la principal associació estatal en aquest camp. Si miro la llista dels premiats dels darrers 10 anys em sento honorat de formar-hi part. Aquest premi és una satisfacció i una empena

perquè tant jo com la gent amb la qual treballa continuem desenvolupant la nostra feina.

La seva recerca ha estat encaminada al disseny i aplicació de mètodes de mecànica quàntica / mecànica molecular (QM/MM) a problemes d'interès pràctic i a l'estudi computacional de sistemes moleculars en els que intervenen àtoms de metall de transició. Què el va dur a treballar en aquest camp?

Sóc químic teòric, de fet quan vaig acabar la carrera de química ja vaig encaminar la meua recerca cap a la química computacional. Sempre m'han agradat els ordinadors i en aquella època la química computacional començava a destacar. Vaig començar a treballar en l'àrea dels metalls de transició, perquè els meus directores de tesi així m'ho van aconsellar. A mesura que vaig anar-hi treballant vaig començar a usar els mètodes que ja estaven definits en aquell moment que eren mètodes de mecànica quàntica. Amb el pas del temps i per poder resoldre problemes pràctics vaig col·laborar en el disseny de nous mètodes. Va ser aleshores quan vaig decidir treballar amb mètodes de dinàmica quàntica i mecànica molecular.

En la química teòrica, hi ha com una mena de discussió entre els químics per veure qui és més teòric que l'altre, qui aplica la metodologia més pura, més matemàtica. Crec que cal fer teoria quan és necessària. Jo vaig decidir desenvolupar els mètodes de QM/MM perquè no hi havia cap altra teoria que ens permetés fer el que volíem. Així, amb el pas dels anys, amb el meu grup de recerca hem continuat desenvolupant aquests mètodes i treballant-hi, perquè no hi ha prou amb

desenvolupar un mètode sinó que cal demostrar que funciona. És aquí on apareix l'aplicació d'aquests mètodes a problemes d'interès pràctic, com ara la catàlisi selectiva.

En què consisteix exactament el seu projecte de recerca? Quines són les seves aplicacions pràctiques?

En el meu grup de recerca, des del punt de vista de projecte formal, fem catàlisi homogènia computacional. La catàlisi homogènia és fer catàlisi en dissolució. La catàlisi es pot fer amb catalitzadors solubles o sòlids. A nivell industrial, la catàlisi amb sòlids o heterogènia permet obtenir grans quantitats de producte i separar-los bé, per exemple per fer materials plàstics. La catàlisi homogènia permet, tot i que és més difícil fer-la a gran escala, obtenir productes de més puresa, com per exemple els que necessita la indústria farmacèutica per elaborar medicaments, ja que els enantiòmers d'un compost quiral poden presentar diferències crítiques en els efectes farmacològics produïts per un sistema biològic. Per això, la catàlisi homogènia permet obtenir més fàcilment una gran puresa enantiomèrica d'un compost quiral.

Un altre camp d'acció dins la catàlisi homogènia és la cerca de reaccions més eficients. És a dir, es dissenya la reacció no només perquè funcioni, com es feia abans, sinó perquè a més sigui més neta i sostenible. Això implica la cerca de processos nous i, en aquest sentit, els químics teòrics col·laborem amb els químics experimentals intentant resoldre plegats mecanismes de reacció. Per a mi, la química experimental i la computacional o teòrica són complementàries.

El 1991 va doctorar-se i va començar la seva tasca investigadora. Després de 20 anys dedicats a la recerca, quin balanç en fa?

De fet des de l'any 1986, quan vaig iniciar la meua tesi, fins a l'actualitat ha canviat substancialment la manera de fer recerca en química computacional, i el que ha evolucionat més han estat els recursos informàtics i la potència de càlcul. Per exemple, un càlcul plantejat en la meua tesi i que aleshores era molt costós computacionalment ara es pot solucionar tranquil·lament en unes pràctiques de grau. L'augment exponencial de la potència de càlcul ha estat la gran diferència durant aquest temps i en relació amb aquest aug-

ment també han evolucionat els mètodes. Són necessaris nous mètodes que puguin aprofitar aquesta gran potència de càlcul. Per exemple, fa 20 anys es podien fer estudis quantitius de sistemes petits, de 10 àtoms en una molècula orgànica. Ara podem fer estudis de centenars d'àtoms, això ens permet anar acostant-nos poc a poc del món microscòpic al macroscòpic.

“El CESCA ha estat molt important en moments difícils per fer càlculs en el nostre grup i sempre ha estat una eina útil i eficaç”

El 2004 va deixar la docència a la UAB per dedicar-se per complet a la recerca a l'ICIQ. Què ha suposat per a vostè aquest canvi?

La creació de l'ICIQ va ser una oportunitat per a mi. A la UAB treballava en el grup de recerca del Prof. Agustí Lledós i estava molt satisfet, però fer recerca a la universitat pot arribar a ser una mica difícil, ja que existeix una certa rigidesa burocràtica i aconseguir finançament també és més complicat. Aquí a l'ICIQ tenim un pressupost de recerca que, tot i no ser extremadament elevat, ens permet poder contractar a un bon estudiant postdoctoral que vulgui venir a treballar amb nosaltres. Podem contractar-lo immediatament i suggerir-li després que demani beques a convocatòries públiques. A la universitat passa el contrari, l'estudiant ha de presentar una sol·licitud i si li hi donen podrà accedir-hi. Per això, bons candidats es passen mesos esperant i llavors rebem una oferta de l'estranger i han de marxar, tot i que la seva idea era fer recerca aquí. A més, l'ICIQ dóna la possibilitat de poder col·laborar amb altres investigadors de molt bon nivell que treballen al Centre.

L'ICIQ trenca la dinàmica d'àrees de coneixement separades que sí existeix a la universitat, ja que per a la docència és bo separar els conceptes, i és precisament aquesta interacció entre diferents disciplines la que enriqueix la investigació. A l'ICIQ som tres grups computacionals i interactuem molt amb els grups experi-

mentals, fem seminaris conjunt i moltes col·laboracions. Per a la química computacional és molt important tenir bons col·laboradors en química experimental, ja que el nostre treball té per objectiu ser aplicat i per això aquesta interacció és molt necessària.

Durant tot aquest temps el CESCA ha facilitat la seva recerca, primer a la UAB i després a l'ICIQ, com valora els serveis del CESCA en aquesta etapa?

Sóc usuari del CESCA des dels seus inicis. De fet, els inicis del CESCA van coincidir amb una època en què a la UAB es va retallar molt el pressupost dels serveis informàtics i calcular al CESCA era pràcticament l'única sortida que teníem si volíem continuar fent recerca. Sempre ha existit una dicotomia entre treballar amb els recursos propis o amb aliens. Crec que s'ha de trobar l'equilibri, ja que els poders públics així ho suggereixen.

Per a mi, el CESCA ha estat molt important en moments difícils per fer càlculs en el nostre grup i sempre ha estat una eina útil i eficaç. Estic molt satisfet de poder haver gaudit dels seus serveis durant tots aquests anys, perquè a més sempre hem tingut una relació personal molt estreta, ja que el CESCA és un centre molt proper que ens ha ajudat a resoldre problemes, ens ha deixat provar nou programari... en resum, ens ha fet més fàcil la nostra feina.

L'ICIQ és un centre de recerca relativament nou, porta 7 anys en funcionament. Quines són les característiques que l'identifiquen?

L'ICIQ és un centre de recerca que es basa en models que tenen èxit a l'estranger, però potser no tant en l'Estat espanyol. És un centre que busca l'excel·lència en recerca, que vol oferir una química de qualitat per al país, però això no vol dir necessàriament oferir llocs de treball exclusius per a la gent del país. Busquem els millors investigadors possibles independentment del seu lloc de procedència, tot i que evidentment hi ha una sobrerrepresentació de gent catalana i de la resta de l'Estat respecte als estrangers. Tot i així, hi ha bastants *group leaders* estrangers treballant aquí i tenim força representació estrangera quant a investigadors doctorals i postdoctorals.

Una altra característica que cal destacar és que l'ICIQ centra la seva política a evitar les traves burocràtiques que s'im-



Feliu Maseras va obtenir el grau de doctor en Química a la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) el 1991. Va fer una estada de dos anys com a becari postdoctoral de la Unió Europea amb en Keiji Morokuma a l'Institut for Molecular Science (Japó) i, posteriorment, va treballar dos anys com a investigador associat (*chargé de recherche inter*) amb l'Odile Eisenstein a Montpellier (França). Ha realitzat també diverses estades com a Emerson Center Visiting Fellow a la Universitat d'Emory (Atlanta, Estats Units). Va obtenir una posició de professor titular a la UAB el 1998. Ha ocupat aquesta plaça a la UAB fins al seu trasllat a l'ICIQ el 2004 com a responsable de grup.

Autor de més de cent cinquanta publicacions en revistes científiques, els seus articles han estat citats més de 2.000 vegades en els últims 10 anys. Receptor l'any 2000 de la Distinció per a la Promoció de la Recerca Universitària (categoria jove) atorgada per la Generalitat de Catalunya. Coeditor del llibre *Computational Modeling of Homogeneous Catalysis*, publicat per Kluwer el 2002. La seva recerca s'ha concentrat en el disseny i aplicació dels mètodes de mecànica quàntica/mecànica molecular (QM/MM) a problemes d'interès pràctic, i a l'estudi computacional de sistemes moleculars on intervenen àtoms de metall de transició.

posen moltes vegades a centres similars. D'aquesta manera es disminueix el treball burocràtic i es facilita l'accés ràpid als recursos disponibles, i aquesta premissa agilitza la nostra feina. També cal remarcar l'esmentada col·laboració interdisciplinària i el programa Tenure Track que ofereix la possibilitat d'oferir recursos a investigadors que tot just acaben el seu programa postdoctoral perquè puguin formar el seu propi grup de recerca.

Enguany és l'Any Internacional de la Química. Què creu que aporta aquesta disciplina a la nostra societat?

L'Any Internacional de la Química ens ha permès poder reflexionar i adonar-nos que la química és una ciència central que comparteix fronteres amb d'altres, com ara la medicina, la física, les àrees industrials

d'enginyeria, la biotecnologia... Per tant, hem de veure la química com una disciplina que s'enriqueix d'altres disciplines i que constantment està ampliant el seu camp d'acció. La química està a punt de fer una gran expansió perquè contínuament apareixen nous desafiaments en els quals hi té un paper clau. Així, serà l'encarregada de donar resposta a la creació

—
“És necessari donar a conèixer la química com a una ciència indispensable per a la nostra vida”
—

de noves fonts d'energia, a la composició de nous biomaterials, haurà d'aconseguir ser més sostenible...

Per tot això, crec que és important que es facin anys internacionals de ciències bàsiques com enguany, perquè en la societat es dona massa pes a l'ensenyament d'humanitats, qüestions com ara la llengua o la història estan molt presents avui dia a la nostra societat. En canvi, hi ha un cert desconeixement científic bàsic que queda palès a l'hora d'avaluar crisis sanitàries o nuclears com la succeïda a Japó després del terratrèmol. És necessari donar a conèixer la química com una ciència útil i indispensable per a la nostra vida, i no com una indústria que pot generar en casos desafortunats productes perjudicials o residus. ■