

Miquel Solà i Puig ha estat distingit amb un dels 30 premis ICREA Acadèmia, que concedeix la Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA). Aquest premi li permetrà “alliberar” una mica de temps de docència i destinar-lo a potenciar una nova línia de recerca sobre interaccions a nivell de proteïnes. En els 18 anys que porta treballant a l’Institut de Química Computacional de la Universitat de Girona (UdG), la seva recerca s’ha centrat en dues grans línies, d’una banda, el desenvolupament metodològic de noves eines de càlcul mecan quàntic i, de l’altra,

l’aplicació d’aquestes eines i de programari estàndard a la resolució de problemes d’interès químics. El seu equip treballa en àmbits com ara l’anomenada química verda, reduint els residus produïts en les reaccions químiques; l’estudi de reaccions orgàniques, especialment aquelles en què intervenen ful·lerens, i reaccions de sistemes bioinorgànics i organometàl·lics; receptors del gust, desenvolupament de marcadors de proteïnes, aromaticitat en molècules... Les aplicacions de la seva recerca són tan diverses com la varietat de grups experimentals amb què col·laboren.

FOTOGRAFIES: JORDI PARETO



ENTREVISTA A MIQUEL SOLÀ, PREMI ICREA ACADÈMIA

“El treball amb receptors del gust pot millorar, per exemple, el gust del pinso dels animals”

El mes d’abril va ser guardonat amb un dels 30 premis ICREA Acadèmia, que atorga la Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats. Què representa aquesta distinció?

A mi em sembla que és un reconeixement a la tasca que ha dut a terme el nostre grup de recerca en els darrers 5 anys. Encara que sigui un reconeixement personal, a ningú se li escapa que avui en dia la recerca en pràcticament tots els àmbits de la ciència es fa en equip i, per tant, aquest premi ICREA Acadèmia s’ha d’entendre com una distinció al grup donat que la recerca que s’ha premiat no s’ha-

gués pogut dur a terme sense la col·laboració decisiva dels estudiants de doctorat i postdocs del grup. A nivell personal, em permetrà reduir la dedicació a l’activitat docent i incrementar el temps dedicat a tasques de recerca, ja que puc utilitzar part de la subvenció concedida per contractar un professor associat que faci part de la docència que m’encarrega el Departament. La meva intenció és dedicar part d’aquest temps alliberat a potenciar una nova línia de recerca que estem obrint sobre interaccions a nivell de proteïnes i a demanar una Advanced Grant al European Research Council.

Avui dia, una part de la seva tasca investigadora s’adreça a reduir els residus produïts. Com ha anat evolucionant al llarg dels anys la seva recerca?

Quan parlem de reduir els residus produïts en les reaccions químiques normalment ens referim a un dels aspectes centrals de l’anomenada química verda. En aquesta línia de treball es tracta de millorar els processos químics per aconseguir els mateixos productes amb una despesa energètica menor i amb una producció mínima de residus. La química computacional aporta dades que ajuden els químics experimentals que treballen

en aquest camp i, per això, sovint ens demanen la nostra col·laboració.

Pel que fa a l'evolució de la meua recerca, des d'un bon principi ja vaig centrar la meua activitat de recerca en dues grans línies com són, per un costat, el desenvolupament metodològic de noves eines de càlcul mecanoquàntic i, per un altre, l'aplicació d'aquestes eines i de programari estàndard a la resolució de problemes d'interès químic. Aquesta separació de la recerca en dos grans blocs no l'he canviada al llarg del temps. Em sembla fonamental que els químics teòrics i computacionals siguem capaços de desenvolupar coneixement en aquestes dues direccions que són molt diferents, però que es complementen perfectament de tal manera que l'avenç en una de les línies repercuteix favorablement en l'altra.

En el camp del desenvolupament metodològic, durant la tesi vaig treballar en la teoria d'enllaç de valència. En arribar a l'Institut de Química Computacional (IQC) de la Universitat de Girona (UdG) em vaig interessar per les mesures de semblança molecular quàntica que havia desenvolupat el Prof. Ramon Carbó-Dorca i, més recentment, ens hem centrat en l'estudi i anàlisi de la localització i deslocalització electrònica amb especial èmfasi en tot el relacionat amb les mesures d'aromaticitat molecular.

Des del punt de vista d'aplicacions, el ventall d'estudis ha estat molt ampli perquè depèn en cada moment de possibles col·laboracions que s'estableixen amb

els grups experimentals i dels interessos particulars de cadascun d'aquests grups. Durant la tesi vaig estudiar l'enzim anhidrasa carbònica i, posteriorment, he treballat en l'estudi de reaccions orgàniques, especialment d'aquelles en què intervenen ful·lerens, i reaccions de sistemes bioinorgànics i organometàl·lics. Darrerament en el grup hem començat a treballar en l'estudi de receptors del gust i el desenvolupament de marcadors de proteïnes.

“Des del 1993, a la UdG hi ha una professionalització creixent i ha augmentat el nombre d'estudiants, professors i investigadors”

Per a què seran útils aquests treballs en receptors del gust i el desenvolupament de marcadors de proteïnes?

En el cas dels receptors del gust hem demostrat amb càlculs de mecànica molecular que pel receptor humà del gust dolç l'energia d'interacció del substrat amb el receptor és aproximadament proporcional a la potència gustativa del substrat. Partint d'aquesta hipòtesi és possible dissenyar molècules que tinguin una elevada potència gustativa, no només per als humans sinó també per a animals, com ara els porcs, pels quals es coneix l'estructura primària d'aquests receptors. Això

hauria de permetre, per exemple, millorar el gust del pinso dels animals.

Pel que fa al desenvolupament de marcadors de proteïnes, la idea és molt semblant. Es tracta de buscar substàncies (sovint di- o tripèptids) que tinguin una gran afinitat per una determinada proteïna. A continuació, s'afegeix un component a la molècula que doni una senyal potent de ressonància magnètica nuclear (NMR) i ja tenim un bon marcador. Introduït el marcador a l'organisme, aquest tindrà una gran tendència a enganxar-se amb la proteïna que es vol estudiar. El seguiment del senyal d'NMR ens mostrarà de forma instantània els llocs de l'organisme on aquella proteïna determinada es troba concentrada i d'aquesta manera es pot obtenir informació de molt d'interès pel que fa a l'activitat de la proteïna en qüestió.

També dedica part de la seva activitat de recerca a l'estudi de l'aromaticitat. Perquè és important conèixer aquesta propietat que tenen dues terceres parts de les molècules?

L'aromaticitat és una propietat que tenen determinades molècules formades per anells i que afecta de forma clau la seva estructura electrònica i molecular, estabilitat, reactivitat i altres característiques com poden ser la polaritzabilitat o les propietats magnètiques. En general, si bé cal dir que amb força excepcions, les molècules aromàtiques són més simètriques, més estables i menys reactives que les que no ho són. Analitzar l'aromaticitat molecular ens permet entendre i predir l'evolució d'un nombre molt important de reaccions.

Des de l'any 2001 amb el descobriment de l'espècie Al_4^{2-} hi ha hagut una gran revifada en l'estudi de l'aromaticitat molecular que ha situat aquesta propietat com un dels temes de treball més actius de la química contemporània. Un problema important en aquest camp és la manca d'una definició precisa del terme aromaticitat que fa que hi hagin múltiples maneres de mesurar-la que, malauradament, donen lloc a ordenacions moleculars per aromaticitat moltes vegades no coincidents.

En la nostra recerca, hem contribuït al camp, d'un costat, proporcionant noves mesures d'aromaticitat basades en l'anàlisi de la deslocalització electrònica i, de l'altre, aportant instruments que ens permeten de forma qualitativa determinar quines són les millors mesures d'aromatici-





Miquel Solà va néixer a Fonteta (Baix Empordà) l'any 1964. Al cap de 9 mesos la seva família es va traslladar a Cassà de la Selva (Gironès) on va viure fins

a l'any 1984. Des de 1992 viu a Quart (Gironès) amb la seva dona i un fill de 12 anys. Es va formar com a químic a la Universitat Autònoma de Barcelona, on es va llicenciar l'any 1986 aconseguint el premi extraordinari de llicenciatura. La seva tesi doctoral, desenvolupada a la mateixa universitat i dirigida pels Profs. Joan Bertran i Agustí Lledós, va obtenir el premi extraordinari de doctorat i el premi Sant Albert, atorgat pel Col·legi de Químics de Catalunya. Després de treballar 18 mesos com a consultor informàtic en una

empresa privada a Barcelona, l'any 1993 va ingressar com a tècnic de recerca a la Universitat de Girona (UdG) de la mà del Prof. Miquel Duran. Els anys 1994 i 1995 va fer estades postdoctorals en els laboratoris dels Profs. Evert Jan Baerends, a Amsterdam, i Tom Ziegler, a Calgary. L'any 1997 va aconseguir una plaça de professor titular en el Departament de Química de la UdG. L'any 2001 va rebre la Distinció de la Generalitat de Catalunya per a la Promoció de la Recerca Universitària. Des de l'any 2003 és catedràtic del Departament de Química de la UdG. Ha estat vicedegà de la Facultat de Ciències (2000-04), director de l'Institut de Química Computacional de la UdG (2004-07) i director del Departament de Química de la UdG (2007-2010) fins a la fi del mes passat. Ha estat professor visitant a les universitats d'Amsterdam, Guanajuato, Montevideo, Pisa, Salerno, Santiago de Chile i Varsòvia. És autor de més de 200 articles en revistes internacionals que acumulen un total de 3.750 cites (h=33), ha dirigit 10 tesis doctorals i en té 4 més en curs.

tat d'entre totes les proposades fins ara. Els nostres resultats mostren que les mesures basades en l'anàlisi de la deslocalització electrònica són les més fiables.

Després de treballar un any i mig en una empresa privada a Barcelona quan va acabar la seva tesi doctoral, va tornar a la universitat per continuar-hi la seva carrera professional. Què el va portar a la UdG l'any 1993?

L'any 1991 quan vaig acabar la tesi doctoral amb els Profs. Joan Bertran i Agustí Lledós vaig obtenir una beca per anar dos anys de postdoc al grup del Prof. Schlegel a Detroit. La manca de perspectives professionals a la universitat a mitjà termini em va portar a renunciar a la beca i acceptar una feina de programació en una empresa de consultoria de Barcelona. L'any 1992 es va crear la UdG i l'any 1993, quan portava un any i mig treballant a l'empresa, el Prof. Miquel Duran em va comentar la possibilitat d'incorporar-me en el seu grup com a tècnic de recerca. Sempre m'he sentit més atret pel món acadèmic que per l'empresarial, de manera que no m'ho vaig pensar gaire, vam demanar l'ajut a la Generalitat i en aconseguir-lo em vaig incorporar de forma immediata a la UdG.

Com ha canviat en aquests anys aquesta universitat?

Hi ha hagut una transformació molt important. D'entrada, la construcció de totes les Facultats. L'any 1993 en el Campus de Montilivi hi havia únicament un parell d'edificis de l'Escola Politècnica Superior

i avui en dia ja pràcticament totes les Facultats disposen d'edifici propi. També hi ha hagut una professionalització creixent a tots els nivells i ha augmentat el nombre d'estudiants, professors i investigadors. En els propers anys, com a motor de canvi, crec que tindrà un pes molt important la creació recent de la Facultat i el Departament de Medicina de la UdG.

“El CESCA és el centre que ofereix millors prestacions per a càlculs amb requeriments molt intensius de memòria i disc”

Segons un estudi recent de la Universitat de Granada (*Ranking de 2009 en inversión de las universidades públicas españolas*), de les 48 universitats estudiades, la Universitat de Girona és la 3a en projectes finançats d'R+D, la 8a en articles científics publicats en revistes indexades per l'Institute for Scientific Information, ocupa l'11è lloc en beques de recerca i el 12è en tesis doctorals. Quines són les claus d'aquest èxit en recerca?

El tema dels rànquings d'universitats és molt interessant, però també molt discutit per diverses raons que van des de la fiabilitat de les dades utilitzades per l'anàlisi fins als criteris emprats per ordenar les universitats. Tot i així, de forma re-

current les universitats catalanes, i en particular la UdG, queden generalment ben situades entre les universitats espanyoles i, per tant, alguna cosa deu haver-hi de cert en aquests rànquings. Desconec les raons de l'èxit, però la recerca la fan les persones i segurament que els processos de selecció del professorat i dels investigadors és un tema clau per obtenir bons resultats de recerca.

Juntament amb el Prof. Miquel Duran, han estat usuaris del CESCA des de fa anys. Com ha contribuït aquest Centre en la seva recerca?

Si no recordo malament hem estat usuaris del CESCA des de gairebé el seu inici l'any 1991 i el nostre desig és continuar sent-ho molts anys. El nostre grup no es troba habitualment a la llista anual dels deu usuaris que fan un ús més intensiu del CESCA, però segurament que no estem massa lluny d'aquestes posicions. Cal subratllar que el CESCA ha contribuït de manera decisiva en la realització de molts dels treballs que hem publicat en els darrers 20 anys. Per a nosaltres, és especialment vital la utilització del maquinari del CESCA en aquells projectes que involucren càlculs CCSD(T) amb bases grans que tenen requeriments molt intensius de memòria i disc. Sovint aquests càlculs ens calen per emprar-los com a valors de referència per triar la metodologia de càlcul més adient per atacar un problema concret i el CESCA és sens dubte el centre que ofereix millors prestacions per a càlculs d'aquest tipus. ■