

Retorn als inicis de la química teòrica i computacional de Catalunya *Revisiting the early days of theoretical and computational chemistry in Catalonia*

Rosa Caballol Lorenzo

Universitat Rovira i Virgili (URV). Departament de Química Física i Inorgànica

Resum: En aquest article recorrem els primers temps de la química teòrica i computacional de Catalunya, en reconeixença dels pioners que van possibilitar que aquesta branca de la química en sigui avui un dels motors. La consolidació i el reconeixement que ha assolit es deuen a les recerques específiques que han permès aportar claus d'interpretació i de predicció en diferents camps de la química, dels materials i de la bioquímica, però també, a la potent xarxa col·lectiva que va trobar les vies per a fer visible el paper tan important d'aquesta especialitat.

Paraules clau: Química quàntica, química teòrica, química computacional.

Abstract: In this paper we retrace the early days of theoretical and computational chemistry in Catalonia, in recognition of the pioneers who made it possible for this research field to be one of the driving forces of chemistry today. Its consolidation and recognition has been due to the specific research providing keys for interpretation and prediction in different fields of chemistry, materials science and biochemistry, as well as to the strong collective network that found ways to enhance the prominence of theoretical and computational chemistry's important role.

Keywords: Quantum chemistry, theoretical chemistry, computational chemistry.

Aquesta nota històrica vol transmetre a les generacions més joves com van ser fa poc més de cinquanta anys els primers passos de la química teòrica i computacional a Catalunya, en el gris context de la recerca a l'Espanya dels anys seixanta del segle passat. La informàtica ha evolucionat de tal manera des dels ordinadors d'aquella època que la capacitat de càlcul ha multiplicat per unes quantes potències de deu la dimensió dels objectes d'estudi i la velocitat d'obtenció dels resultats. El progrés del coneixement ha estat exponencial i ha convertit la química teòrica i computacional en una eina indispensable per a la interpretació i la predicció de fenòmens químics i bioquímics complexos en contextos científics clarament multidisciplinaris. Una visió històrica de l'evolució a Espanya, completa i extensament documentada, la dona el treball «Historia de la química teòrica en España», de Joan Bertran [1], de lectura obligada per a qui vulgui una informació detallada del camí ascendent seguit. Ens centrarem aquí més modestament en els inicis a Catalunya, en la consolidació i en les formes d'organització col·lectiva que van contribuir a fer visible la importància de la nostra branca científica, malgrat l'escepticisme amb què sectors experimentals acollien les primeres aportacions, considerades de mer interès acadèmic. Volem aprofitar

aquesta ocasió per a retre homenatge als pioners que en van assentar les bases a Catalunya i van estimular el creixement d'un col·lectiu avui molt nombrós i qualificat que ha convertit la química teòrica i computacional en una branca de la recerca química indiscutiblement potent al nostre país.

Els inicis

Poc després que Schrödinger formulés la seva equació [2], es van publicar les primeres aplicacions de la mecànica quàntica a sistemes químics de més d'un electró que obligaven a plantejar aproximacions, ja que l'equació en qüestió no té una solució exacta. L'estudi de l'enllaç en la molècula d'hidrogen mitjançant el mètode de l'enllaç de valència de Heiter i London [3] i el dels orbitals moleculars de Hund [4] i Mulliken [5] van marcar l'inici del que s'anomenà *química quàntica*. El 1929 Lennard-Jones va donar expressió matemàtica als orbitals moleculars com la combinació lineal d'orbitals atòmics (CLOA) [6]. L'estudi d'àtoms polieletrònics, com el He, mitjançant l'aproximació del camp autoconsistent (*self-consistent field*, SCF) de Hartree-Fock [7] inicià també una metodologia que, juntament amb l'aproximació CLOA, continua sent d'ús habitual avui dia.

Molt aviat, el 1931, Hückel [8] va idear l'aproximació més senzilla de la teoria dels orbitals moleculars, per al sistema π d'hidrocarburs plans conjugats. Aquest mètode totalment pa-

ramètric molt senzill, que parteix d'una simple matriu topològica i que es va anar sofisticant per a incloure heteroàtoms i altres variacions, va permetre explicar d'una manera qualitativa aspectes de la reactivitat d'aquests sistemes durant un parell de dècades.

El mètode de Hartree-Fock i les equacions que se'n deriven permetien plantejar des d'un punt de vista més rigorós i no paramètric sistemes de pocs electrons, però amb resolucions iteratives extremament feixugues. El gran salt cap als sistemes d'interès químic el va propiciar Roothaan [9] el 1951, aplicant el mètode CLOA a aquestes equacions, que les convertí en equacions matricials resolubles amb les eines usuals de l'àlgebra lineal. És la combinació d'aquesta formulació i del desenvolupament creixent de la informàtica el que va donar l'autèntic impuls a la química quàntica, el nucli inicial del que més endavant eixamplaria els seus horitzons cap al que avui coneixem com a *química teòrica i computacional*.

La química quàntica arriba a Espanya a l'inici dels anys cinquanta, amb José Ignacio Fernández Alonso i Salvador Senent Pérez, catedràtics joves de la Universitat de València (UV) i de la Universidad de Valladolid, respectivament. Senent va estar al King's College London i al grup de Coulson al Mathematical Institute de la University of Oxford, i orientà la seva recerca al camp de les vibracions moleculars. Fernández Alonso va fer estades al Centre de Mécanique Ondulatoire Appliquée (CMOA) de París, que dirigia Raymond Daudel, i al grup de Linus Pauling al California Institute of Technology (Caltech). Quan torna a València crea un grup on, al cap de poc temps, el 1957, es defensa la que probablement és la primera tesi de química quàntica defensada a Espanya: *Estudio teórico de la reacción Diels-Alder mediante el método Femo*. La nova doctora, Rosario Domingo, marca també una altra fita en ser la primera dona doctora de la UV. També les seves publicacions [10] són probablement les primeres en el camp efectuat des d'una universitat espanyola.

Els tres pilars de la química teòrica i computacional a Catalunya

A Catalunya encara ha de passar una dècada perquè s'iniciï la investigació en aquest camp. El punt de sortida es produeix a

l'Institut Químic de Sarrià (IQS), a Barcelona, quan el jove doctor Ramon Carbó (que més tard signarà com a Ramon Carbó-Dorca) s'hi incorpora el 1968, després d'estades al CMOA i a la University of Alberta, a Edmonton, amb Serafín Fraga. Ja en la seva tesi hi havia inclòs estudis teòrics [11], fet que permet situar a l'any 1965 la primera publicació feta en aquest camp des d'una institució catalana. Molt aviat hi crea un grup i, sota la seva direcció, el 1974 Josep Maria Riera presenta la primera tesi doctoral [12], que marca el caràcter eminentment metodològic —que en l'època implica també un treball intens de programació— de la investigació que s'hi desenvolupava. Durant aquells primers anys s'estén el mètode de Hartree-Fock a sistemes de capa oberta, es desenvolupa la teoria de pertorbacions i s'introdueixen estudis de potencial electroestàtic a les relacions estructura-activitat. En cada un d'aquests camps es defensa alguna tesi doctoral entre el 1975 i el 1976.

Per una altra banda, el 1968 Santiago Olivella Nello, acabat de llicenciar, s'incorpora com a doctorand al grup de Manel Ballester, a l'Institut de Química Orgànica (d'on sorgirà més endavant l'actual Institut de Química Avançada de Catalunya) del Consell Superior d'Investigacions Científiques, especialitzat en química de radicals lliures estables, una química molt nova en aquells moments. L'Institut, que disposa d'unes instal·lacions i d'un equipament moderns, aplega els investigadors químics més prestigiosos del moment; rep investigadors estrangers, i acull conferències i cursos, entre els quals, un curs de química quàntica a càrrec de Ramon Carbó i de Serafín Fraga. Santiago Olivella s'hi interessa i estableix contacte amb el grup de l'IQS. Un cop defensada la tesi doctoral el 1973, decideix seguir en el camp teòric i fer una estada postdoctoral en el grup de Michel Dewar, a la University of Texas, a Austin. En l'àmbit internacional estan ja en auge els mètodes semiempírics. Els objectius comencen a ser més ambiciosos i s'orienten a interpretar l'estructura i la reactivitat de molècules que interessin als químics sintètics, més complexes que les que s'havien pogut estudiar amb el mètode de Hückel, i també a assolir resultats més quantitius. Roald Hoffmann ja havia proposat el mètode de Hückel estès a tots els electrons de valència [13]. Hi ha dos grups que desenvolupen mètodes per a poder aplicar l'aproximació de Hartree-Fock als sistemes d'interès, i que seran les bases de paquets de programes avui ben coneguts: a la Carnegie Mellon University, a Pittsburgh, John Pople desenvolupa la sèrie d'aproximacions CNDO/INDO [14, 15], embrions del programari GAUSSIAN; i amb diferents

critèris de parametrització, tot i que basant-se en la mateixa aproximació formal, a Austin s'hi desenvolupa la sèrie MINDO/MNDO [16, 17], que constitueix la base del programari MOPAC. Santiago Olivella, durant la seva estada a Austin, adquireix experiència en el programari i en la seva utilització, de manera que, quan torna al CSIC, el 1976, l'introdueix, hi facilita l'accés instal·lant-lo als ordinadors disponibles en aquell moment i —a través de cursos, seminaris i atenent innumerable consultes— exerceix una ingent tasca formativa d'un gran nombre d'investigadors novells en el camp. A més, sap despertar l'interès de químics experimentals, amb qui estableix moltes col·laboracions, particularment quan, a partir del 1981, es trasllada al Departament de Química Orgànica de la Universitat de Barcelona (UB).

El 1969, Joan Bertran Rusca, recentment tornat del CMOA, on havia treballat amb Raymond Daudel, defensa a la UB la tesi doctoral *Estudio teórico de la variación de equilibrios de transferencia protónica inter e intramolecular bajo la influencia de la luz*. El 1970, juntament amb Ramon Carbó, imparteix un curs d'introducció a la química quàntica a estudiants que estan acabant la carrera a l'IQS. Uns quants d'ells, entre els quals tinc el goig d'haver-me trobat, fascinats per aquesta branca nova de la química que acaben de descobrir, s'incorporaran al grup de Ramon Carbó que abans he esmentat. D'altra banda, les universitats autònomes s'acabaven de crear, José Ignacio Fernández Alonso s'havia desplaçat de València a la recentment creada càtedra de química física de la Universidad Autónoma de Madrid i s'obrien possibilitats d'incorporació a la vida acadèmica per a un bon nombre de joves investigadors. Joan Bertran s'incorpora al grup de Fernández Alonso a Madrid, que seria el gresol més important de creació de grups de química teòrica i computacional espanyols, quan es van disseminar cap a altres universitats un gran nombre de professors ja consolidats que investigaven en el camp. Joan Bertran, després d'un periple que inclou la Universidad de Oviedo, la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) i la Universidad de Sevilla, s'incorpora finalment el 1983 a la càtedra de química física de la UAB. El grup que ja s'havia format a la seva primera estada es consolida ràpidament i aborda molts problemes de reactivitat orgànica i organometàl·lica en fase gasosa i en solució.

Tots tres, Ramon Carbó, Santiago Olivella i Joan Bertran (figura 1), cadascun amb les seves experteses, són els pioners que constitueixen els tres pilars de la química teòrica i computacional de Catalunya i en determinen ben aviat el camí ascen-



FIGURA 1. Ramon Carbó (fotografia cedida per ell mateix del seu fons personal), Joan Bertran i Santiago Olivella (fotografies efectuades i cedides per Santiago Álvarez).

dent. Amb la consolidació dels estudis de química en els centres de Tarragona i de Girona, que el 1991 es convertirien en Universitat Rovira i Virgili i Universitat de Girona, durant la dècada dels vuitanta els grups s'estenen territorialment fora de l'àmbit metropolità barceloní.

Els mitjans

L'IQS, a finals dels anys seixanta, disposava d'un ordinador IBM amb 16 kilobytes (kB) de memòria (sí, 16 kB!), en una instal·lació que ocupava tota una sala. Durant la dècada dels seixanta, algunes universitats s'havien anat dotant de centres de càlcul, amb ordinadors IBM 360, IBM 1620... de 32 kB, 64 kB o 128 kB de memòria, unitats de disc addicionals, unitat lectora de fitxes o impressora de paper continu. La figura 2 mostra la primera instal·lació del centre de càlcul de la UV. La comunicació amb l'ordinador es feia a través de fitxes perforades. Tots els centres de càlcul tenien almenys una perforadora, com la que es mostra a la figura 3.



FIGURA 2. Ordinador 1620 de la Universitat de València (UV). Fotografia cedida per l'Archivo Luis Vidal.



FIGURA 3. Perforadora de fitxes IBM 29. Fotografia extreta de la Wikipedia (https://es.wikipedia.org/wiki/Perforadora_de_tarjetas) i publicada sota una llicència Creative Commons Attribution–NonCommercial 2.5 Generic (CC BY 2.5 DEED) (<https://creativecommons.org/licenses/by/2.5/>).

El 1971, el Ministeri d'Educació i Ciència va adquirir un ordinador Univac 1108, que va instal·lar al recentment creat Centro de Proceso de Datos, situat al carrer de Vitrubio de Madrid. S'hi van connectar diverses universitats, entre les primeres, la Universitat Politècnica de Barcelona (avui, Politècnica de Catalunya), a través d'un terminal DCT-2000 a l'antic edifici del rectorat, que va ser operatiu des del 1973. Hi portàvem els paquets de fitxes, de programes o de dades, i uns dies després hi recollíem els resultats. Encara que avui sembli increïble, va representar un progrés notable respecte a la capacitat dels centres de càlcul locals. Afortunadament, la informàtica anava evolucionant ràpidament i el cost de l'equipament cada cop era més accessible, de manera que a la dècada dels vuitanta els grups de recerca es van poder anar dotant del seu propi equipament.

Pel que fa als mètodes de càlcul, per diferents vies, entre les quals va tenir un paper cabdal la programació de codi propi, aviat es va disposar d'un ventall considerable de mètodes avançats: semiempírics, com els que hem esmentat; amb formalismes per a capes obertes; *ab initio*, amb inclusió limitada de correlació electrònica mitjançant teoria de perturbacions o interacció de configuracions; càlculs multiconfiguracionals amb poques configuracions, i alguns càlculs de clúster acoblat (*coupled-cluster*). També es disposava de programari per a analitzar superfícies de potencial i caracteritzar-ne punts estacionaris. A la dècada dels vuitanta, els interessos es van anar diversificant, ja que els mètodes del funcional de la densitat oferien solucions econòmiques per a sistemes de mida creixent, la mecànica molecular combinada amb els mètodes quàntics permetia un altre salt de creixement i hi havia pro-

blemes que requerien tractaments dinàmics o estadístics, entre altres factors. En definitiva, el marc de la química quàntica va quedar petit per a incloure-hi l'evolució del nostre camp de recerca i es va anar eixamplant cap a la química teòrica i computacional.

La Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya

A la dècada dels vuitanta, a Catalunya ja hi havia un col·lectiu important d'investigadors d'aquest camp. L'abril del 1985, Ramon Carbó, Joan Bertran i Santiago Olivella, amb el suport de la Secció de Ciències de l'Institut d'Estudis Catalans (IEC), van crear el Grup de Químics Quàntics de Catalunya, amb l'objectiu de vertebrar els investigadors en química quàntica de Catalunya, promoure la comunicació i el debat científics, potenciar la participació dels més joves i assolir una excel·lència científica reconeguda internacionalment.

El 29 de maig de 1985 es va celebrar la constitució del grup i la primera reunió (figura 4), amb la conferència inaugural a càrrec d'Alan Hinchliffe, seguida l'endemà per una sessió de comunicacions curtes a l'Aula Capella, a l'Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials de Barcelona. A aquesta primera reunió, hi van participar cinc grups i trenta-un assistents. Des d'aleshores, es va fer una reunió anual (figura 5), organitzada rotatòriament per un dels grups, d'un parell de dies de durada, amb conferències a càrrec de ponents invitats i una trentena o més, segons l'any, de comunicacions curtes a càrrec de joves investigadors dels grups (figura 5). Els joves han tingut sem-

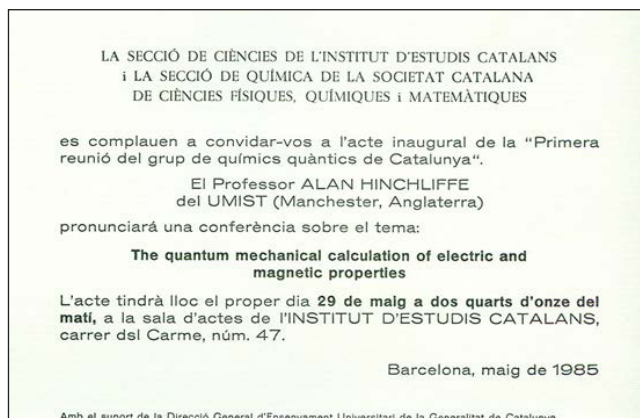


FIGURA 4. Invitació a la I Reunió del Grup de Químics Quàntics de Catalunya. Dissenyada i cedida per Juan Jesús Pérez.



FIGURA 5. V Reunió del Grup de Químics Quàntics de Catalunya, Bellaterra, 1989. Fotografia cedida per Joan Bertran.

pre un paper protagonista en les reunions successives. A les reunions hi assistien també col·legues de Castelló i de València, on es va fer alguna de les reunions. La Secció de Ciències de l'IEC va mantenir uns pocs anys més el seu suport.

La Generalitat de Catalunya va crear el programa «Xarxes temàtiques» i ens hi vam acollir l'any 1994, amb la Xarxa de Química Teòrica, que ja s'estenia a dotze grups, amb activitats centrades no solament en els mètodes quàntics. El finançament era limitat i calia sol·licitar-lo cada any, però permetia continuar organitzant la reunió anual sense ensurts, tot i el creixement constant del col·lectiu, que, a la reunió de l'any 2002, va aplegar 183 participants de vint-i-dos grups. A la figura 6 es mostra una fotografia del col·lectiu a la XIX Reunió, celebrada a Girona l'any 2003.



FIGURA 6. XIX Reunió del Grup de Químics Quàntics de Catalunya, Girona, 2003. Fotografia efectuada i cedida per Miquel Duran.

La via de finançament de les xarxes temàtiques es va tancar, però es va decidir que el col·lectiu era prou madur per a optar a un tipus d'organització més exigent i, l'any 2006, es va crear la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional, subvencionada pel Departament d'Innovació, Universitats i Empresa de la Generalitat de Catalunya, i en la qual es van declarar els objectius següents: fer convergir les línies d'investigació dels grups de recerca, potenciar el caràcter interdisciplinari de la recerca dels grups, donar una imatge coordinada de la recerca en química teòrica que es realitza a Catalunya i promoure activitats de formació científica d'alt nivell en el camp de la química teòrica. Inicialment hi van participar disset grups de recerca reconeguts per la Generalitat de Catalunya, amb 190 investigadors, dels quals, uns vuitanta doctorands, agrupats en les línies de recerca següents:

- modelatge de la cinètica i la dinàmica de reaccions químiques;
- modelatge de superfícies, sòlids i nanopartícules;
- modelatge de sistemes moleculars amb metalls de transició;
- processos fisicoquímics no lineals en sistemes amb matèria tova;
- modelatge de sistemes biològics a nivell mesoscòpic;
- relacions estructura-activitat quàntiques;
- desenvolupament de noves eines.

La nova xarxa, de la qual va ser director Francesc Illas durant tot el període, va representar un canvi força radical de funcionament i d'exigència, ja que implicava un contracte amb objectius definits, l'administració a través d'una entitat gestora —la Fundació Bosch i Gimpera—, la creació d'un consell científic i d'un consell de direcció i l'aprovació d'un pressupost anual, amb una memòria i un rendiment de comptes de l'any. Entre les activitats que es van programar, hi havia la reunió anual; d'aquestes reunions en destaquem la XXV, el 2009, convertida en congrés internacional dedicat al seixanta-cinquè aniversari de Santiago Olivella (figura 7). També es va organitzar anualment una escola d'estiu amb tres mòduls de vint a trenta hores i, de forma bianual, el simposi «New trends in computational chemistry for industry applications». Així mateix, es va participar d'una manera activa en el Màster Interuniversitari en Química Teòrica i Computacional que, del 2007 al 2013, van compartir la UB, la UAB, la Universitat de Girona i la Universitat Rovira i Virgili.

El contracte es va anar renovant, sobretot gràcies als magnífics resultats científics, ja que l'objectiu d'R+D+I s'ajustava



FIGURA 7. XXV Reunió del Grup de Químics Quàntics de Catalunya (simposi «Theoretical chemistry: Modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids»), dedicada a Santiago Olivella amb motiu del seu seixanta-cinquè aniversari. Fotografia del fons de la Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional (XRQTC).

amb dificultat al perfil científic de la xarxa. Així, l'any 2017, el darrer que va rebre finançament, la xarxa agrupava vint-i-tres grups de recerca reconeguts per la Generalitat de Catalunya, amb 320 investigadors, dels quals uns 130 eren doctorands. Per assenyalar només dos indicadors objectius, aquell any es van publicar més de 400 articles i es van defensar vint-i-una tesis doctorals.

És obligat esmentar la participació activa dels químics teòrics de Catalunya en la xarxa de químics teòrics espanyols. En particular, després d'una reunió organitzada per Manuel Yáñez i Otilia Mò a Miraflores de la Sierra, el 1998, aprofitant la regulació del doctorat recentment modificada, es va crear el Doctorado Interuniversitario en Química Teórica y Computacional, que es va iniciar el curs 1999-2000 a la Universitat Jaume I de Castelló i en el qual van participar amb èxit moltes universitats espanyoles i entre elles les catalanes. A la mateixa reunió va néixer també la sèrie de congressos ESPA que s'organitza cada dos anys.

Una nova etapa

A la XXXV Reunió, l'any 2019, s'hi notava un cert cansament, potser una certa desmoralització, que presagiava la necessitat d'un canvi. La pandèmia va acabar de tancar l'etapa. Però la Societat Catalana de Química (SCQ) té una junta motivada que ha decidit augmentar la visibilitat de l'activitat científica que es desenvolupa a Catalunya i, entre trobades de joves investigadors que s'organitzen cada dos anys, ha decidit organitzar reunions especialitzades, que s'han iniciat el 2023 amb

la 1a Reunió de Química Inorgànica i Organometàlica de la SCQ i la 1a Reunió de Química Teòrica i Computacional de la SCQ. Sota el guiatge d'organitzadors i organitzadores joves, capaços de donar un impuls nou i un format més adient, tot pinta diferent! La magnífica resposta a aquesta reunió de químics teòrics —per cert, un altre cop a l'edifici de l'IEC com l'any 1985—, ara organitzada per la SCQ, ha demostrat clarament les ganes i la motivació que hi ha perquè tiri endavant. Llarga vida a la nova etapa!

Agraïments

Aquesta nota històrica està dedicada a Joan Bertran, Ramon Carbó-Dorca i Santiago Olivella, que van ser capaços de fer creure a una generació de joves aventurers, i també alguna aventurera, que iniciarien el camí en una novíssima branca de la química. El meu agraïment més sincer, així mateix, als dos magnífics fotògrafs reconeguts del col·lectiu, Santiago Álvarez i Miquel Duran, per haver deixat constància de tants moments inoblidables, alguns dels quals s'han reproduït aquí. I al company Juan Jesús Pérez. També he d'agrair als amics de la Universitat de València el fet d'haver fet camí amb nosaltres durant uns quants anys i, en particular, a Nacho Nebot i Paco Tomás la cessió d'algunes fotografies: un agraïment especial a la Universitat de València i a l'Archivo Luis Vidal per a autoritzar-nos a utilitzar la de la figura 2. Finalment, vull agrair la invitació del president de la Societat Catalana de Química (SCQ), Gregori Ujaque, i la insistència de Mercè Deumal i Maria Besora, perquè posés negre sobre blanc aquest viatge més aviat sentimental de la química teòrica i computacional de Catalunya.

Referències

- [1] BERTRAN, J. «Historia de la química teórica en España». *An. Quim.*, 107 (2011), p. 102-109.
- [2] a) SCHRÖDINGER, E. «Quantisierung als Eigenwertproblem». *Ann. Physik*, 79 (1926), p. 361-365, 437-490 i 489-527.
b) SCHRÖDINGER, E. «An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules». *Phys. Rev.*, 79 (1926), p. 1049-1070.
- [3] HEITLER, W.; LONDON, F. «Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik». *Z. Physik*, 44 (1927), p. 455-472.
- [4] HUND, F. «Zur Deutung der Molekelspektren. I». *Z. Physik*, 51 (1928), p. 759-763.

- [5] MULLIKEN, R. S. «Electronic structures of polyatomic molecules and valence. II. General considerations». *Phys. Rev.*, 41 (1932), p. 49-71.
- [6] LENNARD-JONES, J. «The electronic structure of some diatomic molecules». *Trans. Farad. Soc.*, 25 (1929), p. 668-685.
- [7] a) HARTREE, D. R. «The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods». *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, 24 (1928), p. 89-110. b) FOCK, V. «Approximation method for the solution of the quantum mechanical multibody problems». *Z. Physik*, 61 (1930), p. 126-148.
- [8] HÜCKEL, E. «Quantentheoretische Beiträge zum Benzolproblem». *Z. Physik*, 70 (1931), p. 204-286.
- [9] ROOHTAAN, C. C. J. «New developments in molecular orbital theory». *Rev. Modern Phys.*, 23 (1951), p. 69-89.
- [10] FERNÁNDEZ ALONSO, J. I.; DOMINGO, R. «Para-localization energy (free-electron molecular-orbital method) and polarographic half-wave potential of some polynuclear hydrocarbons». *Nature*, 179 (1957), p. 828-829.
- [11] a) CARBÓ, R.; MOLINA, J. «Cálculo teórico del calor de quimisorción de moléculas con enlaces pi sobre metales». *An. RSEFQ*, B61 (1965), p. 1169-1178. b) CARBÓ, R.; MOLINA, J. «Cálculo teórico del calor de quimisorción del hidrógeno sobre metales». *Afinidad*, 22 (1965), p. 101-107.
- [12] RIERA ANGUERA, J. M. *Teoría generalizada del campo auto-coherente: Aplicación al estudio del dióxido de nitrógeno*. Barcelona: Institut Químic de Sarrià, 1974.
- [13] HOFFMANN, R. «An extended Hückel theory. I. Hydrocarbons». *J. Chem. Phys.*, 39 (1963), p. 1397-1412.
- [14] a) POPLE, J. A.; SANTY, D. P.; SEGAL, G. A. «Approximate self-consistent molecular-orbital theory. 1. Invariant procedures». *J. Chem. Phys.*, 43 (1965), p. S129-S136. b) POPLE, J. A.; SEGAL, G. A. «Approximate self-consistent molecular-orbital theory. II. Calculations with complete neglect of differential overlap». *J. Chem. Phys.*, 43 (1965), p. S136-S151.
- [15] POPLE, J. A.; BEVERIDGE, D. L.; DOBOSH, P. A. «Approximate self-consistent molecular-orbital theory. V. Intermediate neglect of differential overlap». *J. Chem. Phys.*, 47 (1967), p. 2026-2033.
- [16] BINGHAM, R. C.; DEWAR, M. J. S.; LO, D. H. «Ground-states of molecules. 25. MINDO-3 - improved version of MINDO semiempirical SCF-MO method». *J. Am. Chem. Soc.*, 97 (1975), p. 1275-1293, 1294-1301, 1302-1306 i 1307-1311.
- [17] DEWAR, M. J. S.; THIEL, W. «Ground-states of molecules. 38. MNDO method. Approximations and parameters». *J. Am. Chem. Soc.*, 99 (1977), p. 4899-4907.



R. Caballo

Rosa Caballo Lorenz és doctora per l'Institut Químic de Sarrià (IQS), on va dur a terme la tesi doctoral sota la direcció de Ramon Carbó. És llicenciada en ciències químiques i doctora per la Universitat de Barcelona (UB). Actualment és catedràtica emèrita de la Universitat Rovira i Virgili (URV), on treballa des del 1977, quan el centre encara era la Delegació de la Facultat de Ciències de la UB. Hi ha desenvolupat la seva recerca en química teòrica, en el camp del desenvolupament metodològic en tècniques d'interacció de configuracions amb aplicacions en el camp del magnetisme molecular. A més de docència, entre les seves activitats acadèmiques, destaquen la coordinació del Màster Interuniversitari en Química Teòrica i Computacional entre la URV, la UB, la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) i la Universitat de Girona (UdG), del 2007 al 2013, i la coordinació del programa de Doctorat en Ciència i Tecnologia Química de la URV, del 2013 al 2022. Ha estat membre de la Junta de la Societat Catalana de Química (SCQ) del 2002 al 2007. El 1998 va rebre la Medalla Narcís Monturiol atorgada per la Generalitat de Catalunya.