

25 + 65: Un any d'efemèrides per a la química teòrica de Catalunya

Rosa Caballol* i Carles Bo**

*Universitat Rovira i Virgili

**Institut Català d'Investigació Química

Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional

La química teòrica de Catalunya va commemorar durant el 2009 dues efemèrides importants: la XXV Reunió Anual i el seixanta-cinquè aniversari del professor Santiago Olivella.

The theoretical chemistry community in Catalonia celebrated two important events in 2009: the XXVth Annual Meeting and the 65th birthday of Professor Santiago Olivella.

Era l'abril de l'any 1985 quan, per iniciativa dels professors Ramon Carbó-Dorca i Santiago Olivella, naixia el Grup de Química Quàntica de Catalunya, que, des d'aleshores, ha estat un marc de referència per als investigadors que treballen en aquest àmbit a les universitats i als centres de recerca de Catalunya. L'Institut d'Estudis Catalans va donar el seu suport a la iniciativa a través de la seva Secció de Ciències i Tecnologia, que presidia el professor Enric Casassas, i aquest col·lectiu científic va rebre així el primer suport institucional. L'objectiu dels promotors va ser el fet de vertebrar els investigadors que treballaven en aquesta branca de la química per tal que assolís un nivell d'excel·lència de consideració internacional. La primera acció en aquest sentit va ser la creació d'un fòrum de comunicació i de debat entre investigadors del camp teòric de la química dels països de parla catalana, tot donant-li una dimensió internacional i també interdisciplinària. Així, el 29 de maig de 1985, es va celebrar la I Reunió del Grup de Química Quàntica de Catalunya, en un acte inaugural solemne a la seu de l'Institut d'Estudis Catalans, que va tenir continuïtat amb les sessions de comunicacions que van tenir lloc a l'Aula Capella de l'Escola Tècnica Superior d'Enginyers Industrials —avui d'Enginyeria Industrial— de Barcelona de la Universitat Politècnica de Catalunya. Des d'aquella primera reunió, els principals protagonistes de les comunicacions orals han estat sempre els investigadors joves, la qual cosa, tot i ser avui una pràctica força freqüent, l'any 1985 era del tot innovador.

El nom inicial d'aquell col·lectiu, Grup de Química Quàntica de Catalunya, es va anar quedant estret a mesura que creixia i que les temàtiques d'estudi es diversificaven i es feien més interdisciplinàries. Coincidint amb la creació del programa Xarxes Temàtiques de la Generalitat de Catalunya, del qual es va obtenir el suport, el grup es va transformar en la Xarxa de Química Teòrica i Computacional de Catalunya. Però, malgrat el creixement en nombre i en temàtiques d'estudi, les reunions científiques no s'han deixat de repetir any rere any des del

1985, en arribar l'estiu. De manera rotatòria, han anat recorrent les universitats de Catalunya i també la de València i han fet palès l'excel·lent estat de salut del col·lectiu, que ja aplega més de dos-cents investigadors i una enorme diversificació de les temàtiques. El format no ha sofert gaires variacions: una reunió de dos o tres dies, amb alguns conferenciants de renom convidats, molts cops estrangers, i sobretot les sessions de comunicacions curtes a càrrec d'investigadors joves. En alguna ocasió excepcional, el caràcter local de la reunió s'ha estès per convertir-se en congrés internacional, com l'any 1988, en què es va celebrar a Girona el Workshop on Quantum Chemistry, organitzat pel professor Ramon Carbó-Dorca, que va aplegar els especialistes mundials de més renom i va constituir per a molts l'ocasió d'establir profitoses col·laboracions.

Els objectius plantejats, vint-i-cinc anys després, s'han assolit amb escreix. Proves en són el nombre, la grandària i la consideració internacional que mereixen els grups, la seva productivitat, les moltes col·laboracions establertes i els diversos guardons que han rebut els seus membres, però, sobretot, el ventall de temàtiques que s'aborden, sovint en col·laboració amb grups experimentals i, en algun cas, amb el sector industrial. La química teòrica és avui un puntal de la recerca bàsica i aplicada, tant en el camp de la química com en els camps veïns de la física i de la biologia molecular. A Catalunya, s'ha desenvolupat en un entorn multidisciplinari i ha ocupat un lloc rellevant en l'impacte actual d'un ampli espectre de camps científics, de les biomolècules als materials, de la reactivitat química i la catàlisi a la farmacologia o al disseny de nous materials amb propietats d'interès tecnològic. Avui són una vintena llarga de grups els que centren la seva activitat de recerca en aquest camp des de les diferents universitats i centres d'investigació de Catalunya. La intensa activitat científica i la sinergia que genera la relació entre els diferents grups ha culminat amb la creació, l'any 2006, de la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional,¹

1. Vegeu el web <http://www.xrqtc.org>.



El professor Santiago Olivella durant l'acte inaugural de la XXV Reunió a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona, juliol 2009.

amb el patrocini del Departament d'Innovació, Universitats i Empresa de la Generalitat de Catalunya.

Arribem al 2009, doncs, a la XXV Reunió Anual, que es va organitzar del 29 de juny al 3 de juliol a la Universitat de Barcelona sota el títol «Theoretical chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids. Celebrating 25 years of the Theoretical Chemistry Network of Catalonia». Aquest aniversari, en ser destacat per la continuïtat que representa i per la fidelitat de tot un col·lectiu, no és l'única efemèride que els químics teòrics de Catalunya celebrem aquest any, ja que coincideix amb el seixanta-cinquè aniversari d'un dels fundadors d'aquell Grup de Química quàntica de Catalunya, que ha portat, gràcies al treball continuat de molta gent, a la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional. Es tracta del professor Santiago Olivella, al qual es dedica la trobada d'enguany.

El professor Santiago Olivella es va llicenciar en química a la Universitat de Barcelona. La seva tesi doctoral, que va dirigir

el professor Manuel Ballester, va versar sobre radicals lliures orgànics, i és l'interès per la seva estructura electrònica el que va encaminar-lo cap a la química teòrica. Va fer dues estades postdoctorals: una primera al Laboratoire de Chimie Organique Physique del Centre d'Études Nucléaires de Grenoble, a França, i una de més llarga a la Universitat de Texas, a Austin, dins el grup del professor Dewar. A la seva tornada, l'any 1976, es va incorporar al CSIC, del qual ara és professor d'investigació, dins el que actualment és l'Institut de Química Avançada de Catalunya. Des de l'any 1981 fins al 2000, va efectuar la seva activitat d'investigador al Departament de Química Orgànica de la Universitat de Barcelona. Tant com les seves aportacions científiques, des de l'inici, i molt particularment durant els anys de permanència a la Universitat de Barcelona, mereix ser destacada la seva contribució decisiva a la formació dels investigadors, novells i no tant, que desitjaven incorporar la química teòrica a la seva recerca, sigui com a camp exclusiu o complementari al treball experimental. És així com diverses generacions de químics que han consolidat la seva activitat als centres de recerca de Ca-

talunya perceben el professor Santiago Olivella com un referent de coneixement i de rigor, i manifesten el seu reconeixement pel seu mestratge. Qui s'ha acostat buscant el seu consell, sempre ha pogut comptar amb el seu suport generós.

El professor Santiago Olivella és autor de nombroses contribucions científiques que van des dels models teòrics fins a l'estructura electrònica i la reactivitat de compostos orgànics. Les seves contribucions més reconegudes han versat sobre les regles de Woodward i Hoffmann i les seves limitacions, sobre fotoquímica orgànica, sobre mecanismes de reacció de sistemes radicalaris i sobre química atmosfèrica. Aquestes contribucions tenen el reconeixement internacional. Però la comunitat de químics teòrics del nostre país li deu molt particularment la seva aportació al desenvolupament dels mètodes computacionals i, més específicament, a la implementació i la difusió del programa MOPAC. En l'era dels mètodes semiempírics, aquest programa va permetre a tota una generació de joves investigadors el fet d'iniciar-se en la química computacional.

La seva tasca científica i de mestratge en la formació d'investigadors li ha estat reconeguda amb guardons com la Medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic, que li va ser atorgada per la Generalitat de Catalunya l'any 1999, i el 16è Premi Solvay per a la investigació en ciències químiques de la Fundació CEOE, l'any 2003. També va ser elegit

acadèmic de la Reial Acadèmia de Ciències i Arts de Barcelona l'any 2007.

Per la confiança que inspira el seu saber fer i pel seu tarannà inclinat a no defugir ni feina ni compromisos, des del 1999 fins al 2001 va ser director del Centre de Recerca en Química Teòrica de la Universitat de Barcelona. La seva funció va ser decisiva per a la posterior creació de l'Institut de Química Teòrica i Computacional d'aquesta universitat. Pel que fa a la institucionalització del col·lectiu de químics teòrics, ha estat un dels impulsors de la creació de la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional, del Consell de Direcció de la qual forma part. D'altra banda, el seu compromís de país s'ha manifestat amb la seva participació activa durant més d'una dècada a la Junta de la Societat Catalana de Química, dins la qual s'ha de destacar, un cop més, la seva mirada atenta cap als joves i la tasca feta en la preparació de les Trobades de Joves Investigadors, organitzades cada dos anys per la Societat Catalana de Química.

És, doncs, un any de celebració doble per als químics teòrics catalans. Ens omple de satisfacció el fet de poder celebrar els vint-i-cinc anys de treball continuat en xarxa i, encara més, el fet de poder homenatjar el professor Santiago Olivella, un pioner en el camp de la química teòrica i computacional que ha sabut transmetre coneixement i criteri, alhora que ha estat un model i un referent per a un col·lectiu de científics avui ben consolidat i en constant creixement. Per molts anys.