



L'espectacle dels

SALTIMBANQUIS

/Carles Gorini/

La trajectòria que descriuen els àtoms en el trànsit que fan en passar de reactius a productes només és possible observar-la en part. Per poder-la descriure amb més exactitud cal recórrer a les simulacions que proporciona la química computacional.

La *troupe* de saltimbanquis es disposa a iniciar l'acrobàcia. El públic els observa. Tots saben el punt exacte en què comença i acaba l'espectacle. Entre l'un i l'altre hi ha un espai buit. Quan comencen a saltar les piruetes es converteixen en una sorpresa que es revela a cada instant i que acaba quan tots han travessat l'escenari. Les trajectòries que han descrit els han dut a l'èxit. Si es canvia d'escala, és possible arribar a comparar els saltimbanquis amb els canvis que experimenta una molècula al llarg d'una reacció química. El seu procés també és una sorpresa i, alhora, el millor espectacle possible. El públic que ho observa, en aquest cas, són els químics. A diferència de les evolucions circenses en què tots els detalls poden arribar a ser descrits, explicar el moviment dels àtoms al llarg d'una

reacció química no és tan senzill, perquè es produeix en un temps brevíssim, de magnituds de 10^{-12} segons. La trajectòria resulta imperceptible. Per conèixer-la amb exactitud cal recórrer a la simulació.

L'objectiu és imitar els enzims

Mireia Güell és professora a l'IES Vallvera de Salt. S'ha doctorat per la Universitat de Girona amb una tesi que aborda, de manera teòrica, l'estudi de sistemes d'interès bioquímics basats en el ferro i en el coure. Dit d'aquesta manera potser no s'acaba de veure que l'estudi de Güell s'ha centrat en l'estudi del moviment dels àtoms en determinades reaccions



químiques catalitzades per enzims, és a dir, una mena d'espectacle acrobàtic i, a més, en la manera d'explicar-lo.

«El punt de partida és als enzims», adverteix. Els enzims són proteïnes que actuen com a catalitzadors biològics, fan que les reaccions químiques se succeeixin a gran velocitat i amb un consum òptim d'energia. Ho aconsegueixen gràcies al fet que la natura els ha perfeccionat de tal manera que la reacció la duen a terme a temperatures i pressions ambientals. Els químics volen construir sistemes artificials que facin el mateix treball que fan els enzims, volen una química neta. És per aquest motiu que els estudien des de diversos fronts, com són l'experimental o el computacional. En tot cas, no són fronts antagònics, sinó complementaris. La col·laboració entre els investigadors és necessària perquè malgrat la seva mida aparent, un enzim és massa complex per abordar-lo de fit a fit. Els científics col·laboren, doncs, per determinar la part que els interessa estudiar —el principi actiu— i, aleshores, l'aïllen. Aquesta és l'expertesa dels químics experimentals, que són capaços d'identificar els punts de sortida i arribada de la reacció. Canviem altra cop l'escala per descobrir que aquests punts equivaldrien als extrems de l'escenari en què descansen els saltimbanquis abans i després de l'espectacle. A la química computacional, en canvi, li toca esbrinar els secrets de les piruetes i el que és més important, el per què del seu aspecte. En cert sentit, els primers proporcionen una pel·lícula del salt en què falten els fotogrames decisius, que hauran d'afegir els computacionals.

L'estudi de Güell s'ha centrat en l'estudi del moviment dels àtoms en determinades reaccions químiques catalitzades per enzims i, a més, en la manera d'explicar-lo.

Miquel Solà ha dirigit la tesi de Mireia Güell, juntament amb Josep Maria Luis i Marcel Swart. Preguntat pels límits de la química computacional, reconeix —en la mateixa mesura que els seus col·legues— que sempre quedarà un punt d'incertesa que, en el cas que ens ocupa, es deriva del càlcul matemàtic que es fa servir, de saber si és capaç d'interpretar de manera correcta la realitat, això és, si els fotogrames que han afegit a la pel·lícula no desvirtuen el guió original. Aquesta ha estat una de les preocupacions expressades en la tesi de Güell, que no només ha aplicat el càlcul per esbrinar les trajectòries dels àtoms, sinó que, també, ha posat en dubte els mètodes de càlcul emprats fins escatir el que, pels indicis de què disposava (que havien estat proporcionats pels grups de recerca experimentals), s'han demostrat els millors.

Els químics volen construir sistemes artificials que facin el mateix treball que fan els enzims; volen una química neta.

Güell no només ha aplicat el càlcul per esbrinar les trajectòries dels àtoms, sinó que, també, ha posat en dubte els mètodes de càlcul emprats fins escatir els que s'han demostrat com a millors.

L'energia és el problema

Es pot tenir la sensació que els «saltimbanquis” volen, tot travessant el buit. Res més lluny de la realitat perquè el vol no és més que una il·lusió. Els àtoms ho demostren perquè volen, sí, però ho fan subjectes per lleis infranquejables. El seu coneixement és el suport damunt el qual ha d'aparèixer la imatge definitiva, la trajectòria. Güell explica que l'ha guiada l'energia. «En realitat els àtoms avancen enllaçant-se, formant i desformant compostos d'una vida tan efímera que no pot ser copsada per cap instrument», afegix la investigadora. És per aquest motiu que la simulació refà el camí a posteriori, el congela pas a pas i analitza totes les possibilitats de transformació dels reactius a productes.

Amb tot, per refer el camí cal descartar. Josep Maria Luis matisa que, de vegades, descartar és molt important. Fins i tot, va més enllà i parla de destruir coneixement equivocats com un dels objectius de la recerca, de qualsevol recerca. Es descarten, doncs, els camins de reacció que porten de reactiu a producte que requeririen una quantitat inviable d'energia, els que violen les lleis. En l'exemple dels saltimbanquis és quan aquests s'eleven de manera precipitada per caure, indefectiblement, en haver consumit l'energia abans d'arribar a l'altre extrem de l'escenari. És, també, l'evidència que el resultat de la catàlisi ha estat producte d'uns enzims que la fan amb un consum òptim d'energia. No hi ha un principi actiu que la malbarati, tot i que no sempre hi ha un únic camí per reeixir. És per aquest motiu que Josep Maria Luis insisteix a dir que la certesa d'haver trobat el camí correcte no la tindran mai, sempre quedarà la possibilitat que la reacció hagi pres un altre camí pel qual ells no han passat, perquè «entendre la natura és molt i molt difícil i són treballs com els de Mireia Güell els que serveixen per entendre-la una mica millor».

Recerca bàsica

La tesi de Mireia Güell es divideix en dues parts. Una primera, en què hi ha l'estudi computacional de les reaccions dutes a terme per diferents grups de química bioinorgànica, com ara el de Miquel Costas, de la UdG, o el de Nazario Martin, de la Universitat Complutense de Madrid. A la segona, es posa en dubte la validesa d'alguns mètodes de càlcul d'ús més comú i se'n proposen de nous. Es tracta de la primera tesi del grup de química computacional que aprofita les sinergies que es deriven dels estudis de grups de química experimental. És, en definitiva, una recerca bàsica que aporta coneixement de com la natura transforma una molècula en una altra.

L'investigador de la Universitat de Girona Miquel Solà, catedràtic del Departament de Química, ha estat distingit amb un dels Premis ICREA Acadèmia que atorga la Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats.