

Química sense laboratori?

Ignacio Nebot (Institut de Ciència Molecular)

És possible fer química sense utilitzar tot aquest fascinant conjunt de pots, gots d'estranyes formes i alambins retorçats? Avui en dia, l'ordinador pot substituir, de vegades amb un enorme avantatge, els experiments. El disseny mitjançant ordinador de nous fàrmacs o de nous materials, l'anomenada *enginyeria molecular*, proporciona un estalvi considerable, tant en diners com en temps, que és gairebé el mateix. D'una manera similar, els càlculs teòrics permeten posar de manifest la fascinant bellesa de les arquitectures moleculars, de les més simples a les més complexes. El modelatge per ordinador de les reaccions químiques resulta especialment útil quan aquestes transcorren en condicions difícilment accessibles o reproduïbles com, per exemple, en l'atmosfera (la del nostre planeta o la d'uns altres, coneguts o no encara), en el mitjà interestel·lar o en estudis hipotètics sobre com pot ser la vida en condicions molt distintes de les del nostre planeta (exobiologia). De la mateixa forma, permet conèixer amb detall el transcurs de les reaccions químiques, fins i tot d'espècies químiques de vida mitjana molt curta, l'estudi experimental de la qual és molt difícil, si no impossible. No obstant això, allò veritablement important, més enllà del simple modelatge (per complicat que siga aquest) és la possibilitat d'interpretar els fets experimentals, d'elaborar teories químiques, en suma. La química permet establir les relacions que existeixen entre l'estructura de les molècules i les seues propietats químiques, obrint així la porta que dona accés al coneixement més detallat de la matèria en el seu vessant químic.