



A L'ICIQ

Hi ha tres grups de l'ICIQ que treballen en química computacional (Profs. **Bo**, **López**, **Maseras**). Fan els seus càlculs en un clúster d'ordinadors de l'ICIQ i també en els super ordinadors del *Barcelona Supercomputing Center* com **MareNostrum**.

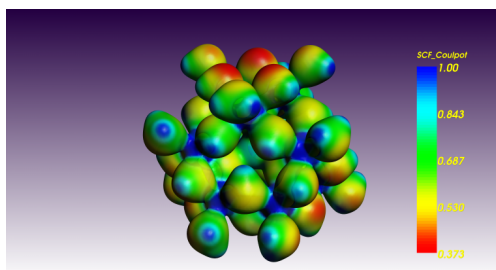
Química computacional

Química computacional

No tota la química es fa en laboratoris plens de matrassos i dissolucions de colors. A la química computacional, s'utilitzen ordinadors per calcular on són i com es comporten els electrons dels àtoms i les molècules.

Gràcies a la capacitat i velocitat de càlcul dels ordinadors, es pot predir el comportament de les reaccions químiques i les propietats dels nous materials.

Un dels grans avantatges de la química computacional és el gran estalvi de temps i diners que suposa. Repetir experiments al laboratori implica una enorme despesa de reactius i dissolvents, a més de grans mals de cap per trobar les condicions de reacció idònies. Preguntar a l'ordinador sol ser més senzill. Introduint unes quantes fórmules i paràmetres, els programes de química computacional poden predir què funciona millor. I, generalment, l'encerten.



La química computacional simula les propietats de la matèria utilitzant ordinadors.

L'ús d'ordinadors no només serveix per endevinar el futur. També són molt útils per explicar què passa dins dels matrassos dels químics experimentals. Moltes vegades podem conèixer els reactius de partida i analitzar la composició dels productes però, com s'han format aquests últims a partir dels primers? Podem ensenyar als ordinadors les regles bàsiques de la química perquè, després, calculin quins són els intermedis de reacció més probables. Un exemple pràctic: podem ensenyar a

l'ordinador uns ous, farina, sucre, oli i un pa de pessic. Ell serà capaç d'explicar que per formar el producte (el pa de pessic), hem batut els ous, hem barrejat els altres ingredients, i hem fornejat la barreja mitja hora. La química computacional també desentranya els mecanismes de les reaccions, una cosa fonamental per comprendre com es comporten les diferents substàncies i per poder avançar en el desenvolupament de noves metodologies i productes.

Per saber-ne més

Altres recursos

- **El robot que tuitea moléculas. (Voz Pópuli)**
- **Mare Nostrum**