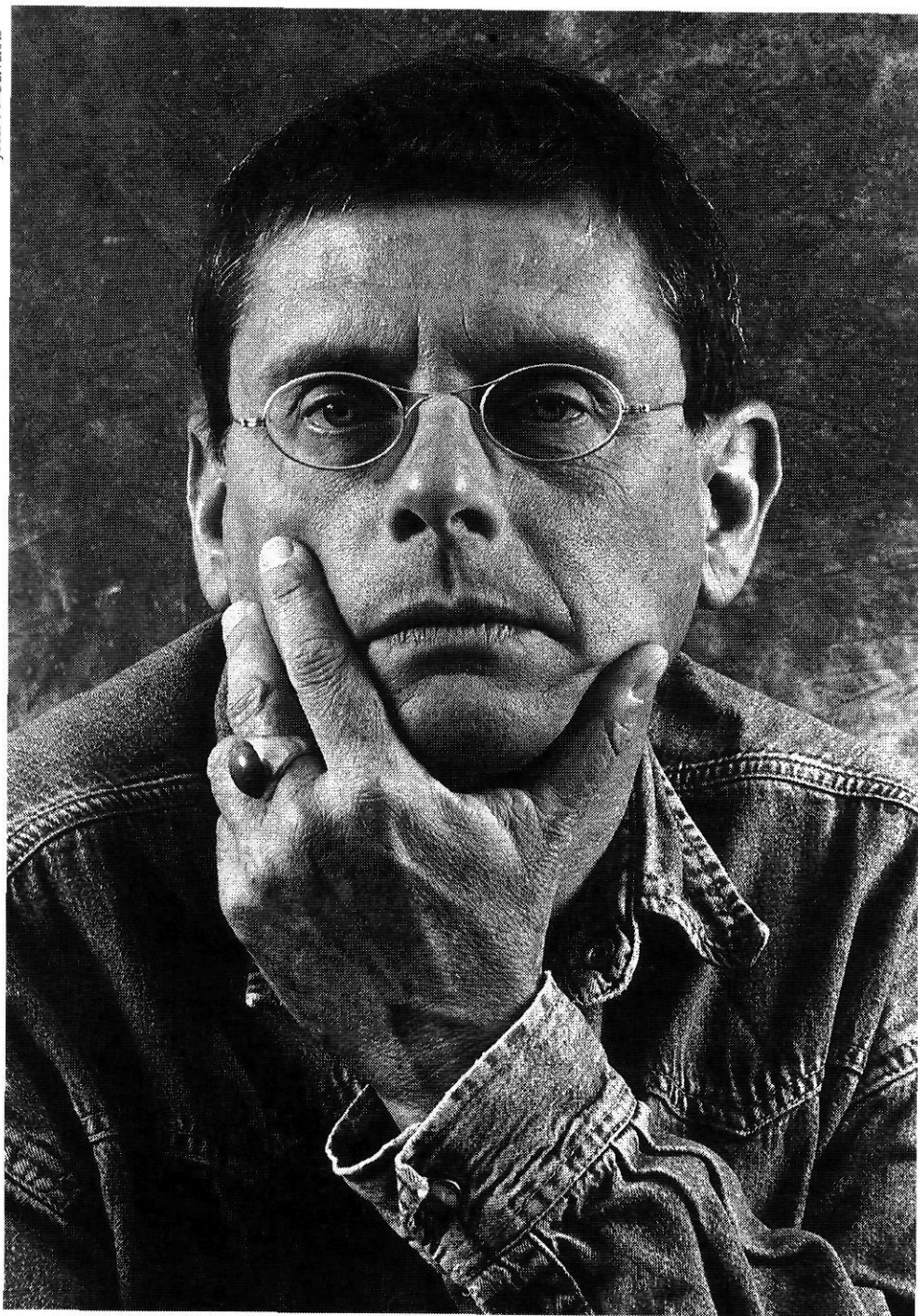


JOSEP M. OLIVERAS



## **Ramon Carbó i la Semblança Molecular Quàntica**

Joan Miró  
Eva Vázquez

# R

amon Carbó i Carré és doctor enginyer químic per l'Institut Químic de Sarrià (1968) i doctor en Ciències Químiques per la Universitat Autònoma de Bar-

celona (1974). Actualment és catedràtic de Química Física de la Facultat de Ciències experimentals i de la salut de la Universitat de Girona i director de l'Institut de Química Computacional, en procés de creació.

— *Acaba de ser condecorat amb la medalla Narcís Monturiol per la seva tasca com a investigador. Quina importància dona vostè al fet que li atorguin aquest premi?*

— Bé, no és un premi, és una medalla(1), i no me la imposen, sinó que m'han demanat si la volia i, contràriament als premis, no va acompanyada d'una quantitat en efectiu de cap classe. Ni tan sols sé el metall del qual està feta; jo suposo que deu ser el bronze o l'aram de què estava recobert i l'ictini, perquè és la medalla Narcís Monturiol, o almenys ha de ser d'algun metall o aliatge que faci referència a l'època de Jules Verne i les «20.000 llegües de viatge submarí». Bromes a part, he sentit opinions diverses de gent provecta respecte als premis i les medalles; una d'elles era d'en Margalef, que va començar un discurs en un acte d'homenatge en el qual li imposaven no sé quina medalla dient que tot això està molt bé, perquè sempre t'honoren d'una manera o altra, però que aquests premis, te'ls haurien de donar quan ets jove, perquè quan ets vell, ja què t'importa que et facin homenatges! L'altra opinió és de J.V. Foix, al qual també li va passar el mateix, només que encara més accentuat que en el cas de Margalef. De fet, a Foix no li van donar ni un sol premi durant l'època franquista. Exceptuant una medalla que li va imposar Fraga Iribarne i que li feia molta vergonya, ningú no li va fer el més mínim cas fins que, de cop i volta, van començar a fer-li homenatges. Ell sempre deia que no havia tingut mai cap premi ni s'havia presentat a cap concurs i que aquest era un element al seu favor. Jo tampoc no m'he presentat a aquest concurs. No sé qui deu haver proposat aquesta medalla ni com han fet la tria entre els meus companys i jo. Com que l'han donada a molta gent, suposo que no deu ser excessivament important i, si me l'han donada a mi, encara menys, tot i que és important potser pel fet que és el primer honor que donen a algú de la Universitat de Girona que no porti cap més mèrit connectat que el fet de ser honorat amb un metall.

— *Quina ha estat la trajectòria científica de Ramon Carbó i Carré?*

— En un moment en què pràcticament no hi havia cap mena d'estímul, ni artístic ni científic —tots sabem com estava la universitat de principis dels

anys 60—, qualsevol petita cosa que es fes donava la sensació que sobresortia molt, però quan repasso els meus treballs d'abans, el primer dels quals és del 65, m'adono de quantes coses que he après, en el sentit que eren investigacions molt elementals, com ho eren, en certa forma, la majoria dels treballs de química quàntica de l'època. Però fins i tot quan els treballs de l'estranger començaven a fer-se més importants i estudiaven objectes químics més grans o problemes més complexos, aquí encara no podíem seguir-los.

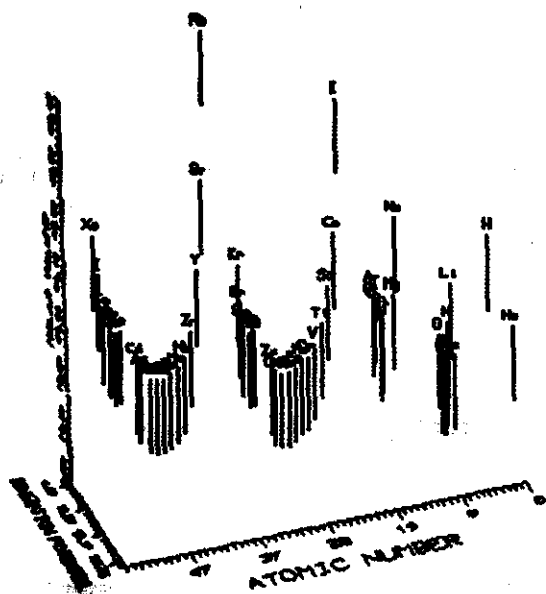
Sempre hem anat una mica endarrerits. Al cap d'un temps, es va començar a notar qui tenia accés als «grans» ordinadors de l'època, que ara farien riure, i això va crear una mena d'escissió entre els químics quàntics o teòrics, aquells que es dedicaven a una teoria més basada en el càlcul mitjançant ordinadors, i aquells que es dedicaven a elaborar teories més refinades per fer aquests càlculs. Forçosament, com que aquí no teníem accés a grans ordinadors, em vaig veure obligat a seguir una línia més dedicada al desenvolupament de la teoria i, per tant, vaig haver d'aprendre moltes matemàtiques, cosa que em va donar un gran avantatge entre els químics en general, que no solen haver-ne estudiat gaires. Fruit d'això va ser una millora qualitativa en els treballs que vaig produir. També s'ha de reconèixer que, amb el temps, vaig tenir alumnes, alguns d'ells molt més avançats que jo, que em va ajudar que el meu pensament escrit fos més elaborat que en els primers treballs. Tot això em va permetre resumir el treball més important en un primer llibre, al qual vaig posar un títol una mica pretensió, «Una teoria del camp autocohent generalitzada». Aquest llibre, escrit amb un dels meus primers alumnes, que dissortadament ha abandonat la recerca, era potser un dels primers que es publicaven al Principat sobre aquest tema. Potser aquesta és una de les fites més interessants de la meua carrera. Després he publicat, fruit, d'una banda, del meu ensenyament a l'Institut Químic de Sarrià i, per l'altra, del meu interès per les matemàtiques, dos llibres de càlcul matricial en editorials del país. A part d'això he estat editor de molts llibres, sobretot de reculls de treballs de congressos.

— *De tots els camps en els quals ha treballat, quin vol destacar especialment, ja sigui pel que fa a pensament teòric com a la seva aplicació?*

— De fet, la meua primera tesi era eminentment pràctica, perquè volia estudiar la catàlisi heterogènia, sobretot la interacció de la molècula d'hidrogen en superfícies metàl·liques. Però com que eren els primers treballs, encara que tenien una certa importància pràctica, eren tan elementals que potser servien en aquell moment, però ara no crec que tinguin tant d'interès, excepte pel que fa al model que vaig emprar, que en aquell moment era una cosa original, on els llocs actius de la superfície se simulaven com una espècie d'imatge metàl·lica de la molècula que s'hi enganxava. El següent pas, que va ser introduir-me a la teoria, potser és una de les branques que he desenvolupat amb més interès, però des d'un punt de vista purament científic, com és el càlcul dels estats excitats de sistemes moleculars. En els temps que vaig desenvolupar aquesta branca pràcticament no hi havia res fet i encara hi ha molts de programes que no contenen aquest punt en la seva totalitat o d'una manera ben explícita. De totes maneres, és un camp que amb el temps he anat abandonant per altres coses.

— *Tot aquest aprenentatge, i les seves investigacions posteriors, on l'han conduït en l'actualitat?*

— En aquests moments, el camp en el qual estem treballant amb el meu equip és el de la Semblança Molecular Quàntica, un concepte desenvolupat a Girona, perquè encara que els primers treballs sobre això ja s'haguessin publicat quan jo encara estava a l'Institut Químic de Sarrià, l'any 80, el concepte no estava treballat en tota la seva extensió com ho està ara. La idea és que dues estructures químiques semblants d'acord amb algun criteri han de tenir propietats semblants; és a dir, com que tota molècula és semblant a ella mateixa, totes les molècules iguals tenen les mateixes propietats. Així, una molècula com, per exemple, el borazol, formada per bors i nitrògens, és hexagonal, té propietats molt semblants al genzé perquè també és hexagonal i això confereix a les dues molècules una semblança estructural que es tradueix en el fet que les seves propietats són semblants. De fet, la semblança molecular quàntica és



La taula periòdica multidimensional —en el cas de la figura, tridimensional— s'obté representant diverses propietats en funció del nombre atòmic. La imatge revela la periodicitat característica dels elements que formen la matèria.

com una extensió de la mecànica quàntica que no havia estat descrita fins ara i que permet connectar dos o més sistemes quàntics distints, no des d'un punt de vista termodinàmic, sinó geomètric. Curiosament, la descripció que fa la mecànica quàntica dels objectes electrònics, per exemple les molècules o els àtoms, és la d'un punt en un espai d'infinites dimensions. És la geometria dels espais infinitidimensionals, allò que permet estudiar aquestes semblances.

El que representem en últim terme a l'ordinador són les projeccions de les relacions geomètriques entre els objectes representats en espais d'infinites dimensions. De la mateixa manera la taula periòdica no és res més que una ombra d'això. De fet, mitjançant la semblança molecular quàntica es reproduïx la taula periòdica, d'alguna manera. En aquests moments som capaços d'ordenar conjunts de molècules d'acord amb les mesures de semblança d'una manera encara més artística, per dir-ho d'alguna forma, que la taula periòdica, que és un descriptor molt matusser de mitjan segle passat. Podem representar conjunts de molècules com si fossin objectes, no infinit-dimensionals, perquè els ordinadors no ho admeten, però sí com si fossin projeccions d'aquests espais i, per tant, transfor-

mem aquestes taules periòdiques moleculars en una espècie d'hipercubs amb tantes dimensions com molècules hi hagi i així els podem notar en uns espais de dimensions finites, però molt grans. Normalment els subespais que contenen aquests conjunts de molècules tenen la mateixa dimensió que el nombre de molècules, encara que això només serveix si es comparen les molècules dos a dos; si es fa de tres en tres seran de dimensió igual al cub del nombre de molècules, i així successivament. Curiosament, aquesta propietat, la possibilitat d'ordenar les molècules, no se li havia acudit a ningú, però és una conseqüència de l'anomenat teorema de Zermelo, que diu que tot conjunt pot ser ben ordenat. Un tractament que té moltes possibilitats d'aplicació pràctica.

L'aplicació o una de les aplicacions més interessants és la possible construcció de molècules biològicament actives. Posem per cas: si algú pensa sintetitzar una nova molècula que tingui una activitat semblant a l'aspirina, per exemple un antiinflamatori, hom pot pintar-la sobre el paper, estudiar-la de manera teòrica mitjançant aquesta tècnica de la semblança molecular quàntica i treure conclusions sobre si realment aquesta molècula que ha imaginat és una bona candidata a tenir les

mateixes propietats de l'aspirina. Això, des del punt de vista dels laboratoris farmacèutics, és bastant interessant.

Però els laboratoris farmacèutics locals han mostrat un desinterès absolut, excepte un d'ells, que sembla que està més convençut que els altres a fer un treball de col·laboració. Bé, és un problema que potser resolldrem en els propers anys, sigui perquè hi hagi més laboratoris que s'hi interessin, o bé perquè aconseguim nosaltres mateixos crear una indústria, relacionada estretament amb la universitat, que es dediqui a sintetitzar nous productes farmacèutics i, després, a vendre'ls al millor postor, tenint en compte que, si s'aconsegueix un substitut d'un antiinflamatori, per continuar amb l'exemple, no descrit ni patentat, i que sigui eficaç evidentment, amb efectes secundaris mínims, pot significar un benefici semblant a les pèrdues del Banesto amb poc temps, ja que qui és que no pren antiinflamatoris!

— Tenint en compte aquest desenvolupament científic, és possible també aplicar la semblança molecular quàntica a la detecció de molècules cancerígenes, si sabéssim que són potencialment cancerígenes?

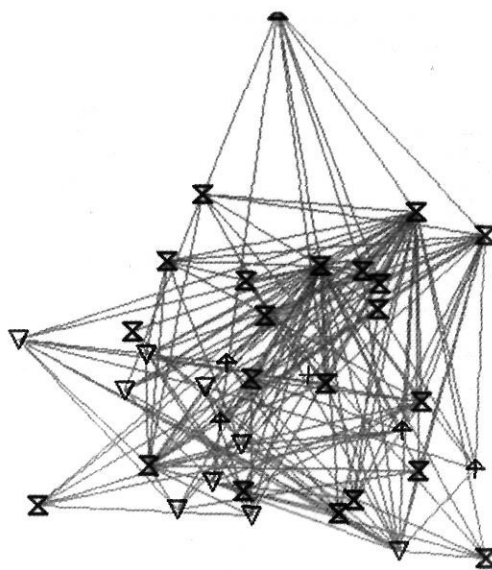
— Sí, òbviament. Qualsevol propietat, sigui físico-química, sigui biològica, d'una determinada molècula, sempre que es conegui que algunes molècules tenen aquesta propietat, es pot saber *a priori* si pot estar present en una estructura coneguda. Per tant, aquesta és una altra aplicació immediata de les tècniques de la semblança molecular quàntica. Una altra aplicació en la qual tot just hem començat a treballar ara és l'activitat enzimàtica. De moment, hem aconseguit demostrar per què varia l'activitat d'un enzim quan se substitueix el zinc, amb el qual va lligat, per magnesi, níquel o ferro, i hem trobat la seqüència exacta entre la variació de l'activitat de l'enzim i la substitució del zinc per un altre metall. Això vol dir que val la pena estudiar altres molècules biològiques, com podrien ser pèptids de petites dimensions, que ja fa temps que s'estan considerant com a bons candidats a ser medicaments per a malalties específiques. També es poden estudiar els antígens. Aquesta investigació ja la volíem fer amb un equip cubà, però ens van denegar una beca que havíem demanat i hem hagut de posposar-ho.

— En què van consistir els seus treballs durant el període que va passar al Canadà?

— He passat dos períodes llargs al Canadà, un va ser cap a l'any 69. Recordo que hi era perquè va ser quan hi va haver la invasió de Txecoslovàquia, quan hi va haver la cèlebre matança d'estudiants a la plaça de les Tres Cultures de Mèxic, i tots els embolics de la guerra del Vietnam i de les protestes dels estudiants als Estats Units. Tot això va coincidir amb la meua primera estada al Canadà, que era una bassa d'oli, com pots imaginar. En aquest primer període vaig estar treballant amb el professor Serafín Fraga càlculs sistemàtics sobre l'estructura electrònica d'un gran nombre de molècules amb un programa que li vaig ajudar a desenvolupar. Fruit d'això són unes quantes col·laboracions amb ell. Aquest treball era interessant, però no em va acabar de satisfer del tot. En canvi, la segona vegada que vaig anar al Canadà, que va ser al 78, vaig anar-hi convidat pel professor Siguero Huzinaga. Allà va ser quan vaig escriure aquell llibre sobre camp autocohent i vaig col·laborar amb Huzinaga en uns quants treballs que dissortadament no es van poder publicar, excepte un que vaig escriure amb un amic noruec, un treball que és com un resum del llibre aplicat a unes molècules concretes. El que em sembla més interessant d'aquesta segona estada al Canadà és que em vaig poder fer molt amic d'un japonès, Huzinaga, cosa que no és una tasca senzilla, i em va permetre d'obrir les opinions a una altra cultura, i això sempre és interessant.

— Després de tot això, es trasllada a Girona; per què? En aquest marc, aconseguix al capdavant un finançament suficient per als seus treballs?

— Durant el temps que vaig estar a Barcelona, el finançament em venia com una almoina dels qui manaven a l'Institut Químic de Sarrià, que eren els reverends pares jesuïtes. Sistemàticament, per una raó que val més no esbrinar —potser jo tampoc no m'ho prenia gaire seriosament— totes les meves peticions de beques al Ministerio de Educación y Ciencia eren rebutjades. Probablement perquè els reverends pares em posaven a la cua perquè no consideraven interessant la meua tasca. Bé, la consideraven interessant perquè els donava un cert prestigi, però no la



*Mitjançant les tècniques de Semblança Molecular podem representar un conjunt de molècules com un conjunt de punts en el pla i calcular relacions entre activitats, per exemple, l'activitat biològica inhibidora d'un enzim. D'aquesta manera és possible classificar molècules d'acord amb l'activitat i fer previsions sobre molècules encara no sintetitzades.*

devien veure tan manipulable com d'altres. L'Institut Químic de Sarrià va canviar la relació entre els reverends pares i els professors coincidint amb els últims anys del franquisme i això va fer que, juntament amb altres circumstàncies personals meves que no vénen al cas, em replantegés la possibilitat d'anar-me'n. Com que era doctor i havia col·laborat durant molts anys amb la Facultat de Medicina de la UAB, vaig pensar en la possibilitat d'abandonar l'Institut Químic de Sarrià, ja que cada vegada es feia més palès que la meua presència allà no tenia cap interès per a aquells senyors. La universitat espanyola està molt cristal·litzada i és molt difícil trobar un lloc. Home, si arribés a ser un premi Nobel, potser farien un cop de cap, però trobo que fins i tot així trobaria les reticències d'alguns estaments. En canvi, l'Aleshores Col·legi Universitari de Girona era una institució en plena efervescència inicial de creixement i semblava que hi podia haver menys reticències, entre altres coses perquè necessitaven professorat. Gràcies als bons oficis de l'entrevistador i de l'actual rector de la universitat, després de molts avatars, vicissituds, paperassa i angoixes, vaig aconseguir un lloc de treball i la promesa d'una oposició a càtedra. Gràcies a aquests bons començaments, per primera vegada en la meua

carrera científica em varen concedir una beca molt important, que devia ser de les primeres que concedien a la UdG d'aquest volum, i es va poder arrancar l'embrió del que ara és, o gairebé, l'Institut de Química Computacional.

Per a investigar, a la Universitat de Girona he trobat més recursos, tant en personal, com en diners, encara que aquests últims temps sembla que costa una mica més. Suposo que, quan no hi ha gaires diners, els qui els reparteixen pensen primer en els químics experimentals que no pas en els teòrics. Però tot i això, no es pot fer una crítica categòrica, perquè ara un dels professors incorporats a l'Institut de Química Computacional, Miquel Duran, ha rebut uns quinze milions. A part d'això, la CIRIT em va donar fa tres anys nou milions i ajuts continuats de quantitats inferiors però que, sumats, donen bastants de diners, a part dels ajuts que proporciona la mateixa UdG. Això ha permès no solament ampliar l'Institut, sinó també comprar nou material, essencialment ordinadors i llibres.

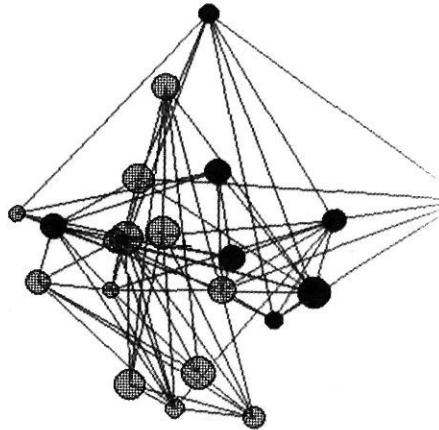
— Així, generalitzant la qüestió, la universitat espanyola rep recursos suficients per a investigació?

— Home, sempre ens podem queixar. A vegades et preguntes quins criteris s'han utilitzat per repartir els diners de la manera que ho fan, però tot és

STEROID MOLECULES

```

*** Similarity Matrix ***
*** Using PCU Columns ***
*** Euclidean Distances ***
*** Min Order Graph ***
*** Prop. Class #: 2 ***
*** Plane : 1-16-( 2) ***
***Dim Z1 Axis: 15***
*** Angle 2 ***
*** Spread 4811**
    
```



```

***PARAL-LEL42 Soft***
*****D-complex*****
    
```

```

*** 12:22:58 ***
*** 16-APR-93 ***
    
```

Una possible aplicació de la Semblança Molecular és l'aplicació farmacèutica. La figura representa un dels estudis d'esteroides efectuat per l'equip d'investigació del Dr. Carbó.

relatiu. Si comparem l'any 72 amb el 92 estem a anys llum d'aquell finançament. Al 72 havies de dependre de la magnanimitat d'una institució i ara, tot i que també hi depenem en certa forma, el finançament ens ha vingut de l'exterior i en quantitats bastant importants que ens han permès no solament continuar la recerca, sinó també organitzar cursos d'estiu de química computacional. Per tant, no sé si els universitaris es poden queixar excessivament. No hi ha pas cap excusa en aquests moments per no fer recerca de qualitat.

— En què consisteix la realitat quàntica i, en concret, quin és l'estat actual de la qüestió oberta amb la paradoxa d'Einstein-Podolsky-Rosen?

— He llegit fa poc, suposo que arran de la pel·lícula «Petit Buda» que un dels marcs de pensament de la filosofia budista és aplicable a la física i, per tant, a la química contemporània, sobretot la teoria quàntica. En el fons, segons el budisme, tot és aparença, no existeix en sí, sinó que tot és un invent de la nostra imaginació. La filosofia de la mecànica quàntica indica en certa manera que el món es pot construir com una cosa que recreem nosaltres mateixos a partir de la imaginació i de la connexió del que nosaltres podem imaginar i els resultats dels experiments. És amb aquests resultats que es pot entroncar

amb la paradoxa d'Einstein-Podolsky-Rosen. Va haver-hi un temps que m'hi vaig interessar enormement, però ara fa un any o dos que no en lleigeixo res. Fa dos anys, tot era una mica confús encara, però potser el més interessant de la paradoxa era la possibilitat que podies imaginar-te moltes més coses, més enllà del que la mecànica quàntica ens havia deixat imaginar fins aquell moment, com per exemple la possibilitat de transmetre simultàniament un missatge a dos punts allunyats en l'infinit; és a dir, la possibilitat de poder-nos connectar amb una altra galàxia de forma instantània, no sotmesos a les lleis de la física relativista, que faria que aquesta velocitat de transmissió d'informació estigués lligada a la velocitat de la llum. Einstein criticava això, encara que paradoxalment ho havia promogut ell. En aquests moments, crec que tots els experiments per veure si la mecànica quàntica tenia alguna falla que es pogués demostrar experimentalment no han prosperat i que la naturalesa es comprèn en funció d'allò que hom pot imaginar d'acord amb els principis de la mecànica quàntica. La paradoxa d'Einstein, que va morir essent un enemic dels científics que construïen la mecànica quàntica, trasllueix la seva lluita per intentar demostrar que la mecànica quàntica estava equivocada. L'origen de la paradoxa

d'Einstein-Podolsky-Rosen, publicada en forma d'article, prové d'un tipus de raonament ideat per Einstein que ell va anomenar *Gedanken Experiment*; és a dir, experiments pensats. La paradoxa és un experiment d'aquest estil que pretenia demostrar que la mecànica quàntica proporcionava una explicació incompleta de la realitat. En el fons, volia demostrar que, si es descrivia l'evolució d'un sistema microscòpic mitjançant la mecànica quàntica de manera que hom no podia predir el futur d'aquell sistema, això portava a la paradoxa que realment es podia predir el seu futur. L'experiment pensat consistia a demostrar que si un sistema inicialment de dues partícules es descomponia i cadascuna de les partícules anava en una direcció oposada a l'altra, en detectar certa propietat d'una de les partícules en l'infinit, podies saber també com era la de l'altra, també en l'infinit, cosa que des del punt de vista de la mecànica quàntica és impossible de predir. La gràcia d'aquesta paradoxa és que és un *Gedanken Experiment* a escala microscòpica, mentre que els altres exemples que pretenen provocar dubtes sobre la mecànica quàntica sempre estan associats a exemples macroscòpics i és ben sabut que, excepte en casos molt especials, les lleis de la mecànica quàntica, si n'hi hagués, no poden descriure el comportament, per exemple, d'una bola de billar. És una cosa ben curiosa, però la mecànica quàntica és una manera de veure el món en la qual no hi ha lleis fixes sinó probabilitats de què succeeixin fenòmens.

— Quins progressos de la química quàntica vol destacar d'aquests últims anys?

— El desenvolupament dels ordinadors en el moment actual permet resoldre l'anomenada equació de Schrödinger, que és el punt principal de la mecànica quàntica. Si aquesta equació no es pot resoldre de manera precisa, hom no pot conèixer el comportament, des d'un punt de vista teòric, dels sistemes químics. Els ordinadors han permès resoldre cada vegada més exactament aquesta equació fins al punt que la precisió amb què es poden determinar, teòricament, les propietats de les molècules de dimensions mitjanes és equivalent a la precisió experimental. Una altra possibilitat és que si coneixes les propietats dels sistemes químics a priori, sense necessitat que

existeixin realment, pots decidir si val la pena sintetitzar aquest sistema o no. Això serveix després per entendre per què els sistemes químics es comporten d'una manera i no d'una altra o, almenys, per trobar una certa explicació que ajudi a dissenyar nous experiments. A més, la mecànica quàntica aplicada a la química és el marc de treball imprescindible en l'ensenyament de la química, de la mateixa manera que ho són la química inorgànica o l'anàlítica. La literatura i la fraseologia química estan plenes de termes d'origen purament teòric. El color dels objectes es pot explicar d'aquesta manera, o la duresa d'un material, o la seva elasticitat.

— Sabent que és un enamorat de les paràboles zen, ens en podria explicar alguna?

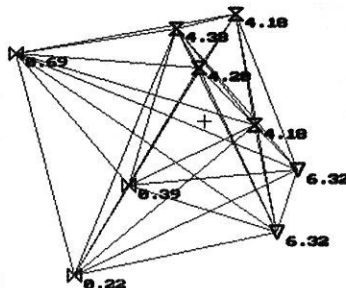
— Uf, n'hi ha moltes. N'hi ha que fins i tot només tenen una síl·laba. De fet, normalment són curtes. És curiós que els estirabots de les paràboles zen es podrien assemblar una mica a l'estat mental que hom ha de tenir quan aprofundeix sobre la mecànica quàntica i la naturalesa del món. Bé, hi ha una paràbola cèlebre: tres monjos, camí d'un monestir famós, es van aturar a la nit per descansar al costat d'una gran penya. Sobre aquesta roca, per algunes raons que no recordo, hi havia unes banderoles, probablement d'aquestes d'oració que posen els budistes per què fins i tot la natura resi les seves jaculatòries. Els tres monjos discutien sobre si aquelles banderoles es movien a causa del vent o si eren ells que s'imaginaven que el vent les feia moure. Estaven en aquesta discussió quan va passar pel camí un venerable monjo zen i, en reconèixer-lo, el van convidar a seure amb ells. Després d'explicar-li la causa de la seva discussió, el mestre va reflexionar durant una bona estona i, al final, els va mirar fixament i els va dir: «És la vostra ment, la que es mou».

Joan Miró és professor de química a la Universitat de Girona.  
Eva Vázquez és periodista.

(1) Creada per decret de 15 d'abril de 1982, juntament amb la placa Narcís Monturiol, la condecoració es destina a honorar les persones que s'han destacat pels serveis prestats a Catalunya pel progrés científic i tecnològic. Placa i medalla són executades en argent.

FLORAL ODOR MOLECULES □(Coulomb)

\*\*\* Similarity Matrix \*\*\*  
\*\*\* Using PCU Columns \*\*\*  
\*\*\* All Complex Drawn \*\*\*  
\*\*\* Prop. Class #: 3 \*\*\*  
\*\*\* Plane 4- 5 \*\*\*  
\*\*\* Din 9 Axis: 5 \*\*\*  
\*\*\* Angle 50 solids \*\*\*  
\*\*\* Spread 6449 \*\*\*

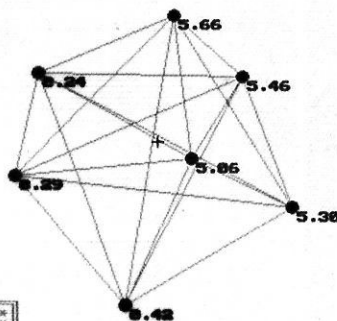


\*\*\*PARAL LEL42 Soft\*\*\*  
\*\*\*\*\*D-complex\*\*\*\*\*  
\*\*\* 12:40:24 \*\*\*  
\*\*\* 16-FEB-93 \*\*\*

< Floral Odor Molecules >

\* TRIDENT v1.0 Normalized Coordinates \*

\*\*\* Trident Coordinates \*\*\*  
\*\*\* Correlation Matrix \*\*\*  
\*\*\* Using PCU Columns \*\*\*  
\*\*\* All Complex Drawn \*\*\*  
\*\*\* Prop. Class #: 2 \*\*\*  
\*\*\* Plane 1- 2 \*\*\*  
\*\*\* Din 7 Axis: 2 \*\*\*  
\*\*\* Angle 0 solids \*\*\*  
\*\*\* Spread 7756 \*\*\*

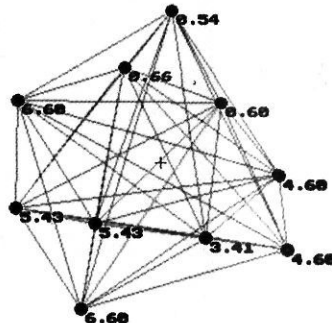


\*\*\*PARAL LEL42 Soft\*\*\*  
\*\*\*\*\*D-complex\*\*\*\*\*  
\*\*\* 19:02:56 \*\*\*  
\*\*\* 12-MAR-93 \*\*\*

< Musky Odor Molecules >

\* TRIDENT Order 2 Distance Matrix \* (Gnpac)

\*\*\* Distance Matrix \*\*\*  
\*\*\*-- Unmodified --\*\*\*  
\*\*\* Using PCU Columns \*\*\*  
\*\*\* All Complex Drawn \*\*\*  
\*\*\* Prop. Class #: 3 \*\*\*  
\*\*\* Plane 8- 9 \*\*\*  
\*\*\* Din 10 Axis: 9 \*\*\*  
\*\*\* Angle 0 solids \*\*\*  
\*\*\* Spread 6227 \*\*\*



\*\*\* 20:00:30 \*\*\*  
\*\*\* 20 FEB 93 \*\*\*

< Minty Odor Molecules >

Aplicació de les tècniques de Semblança Molecular a molècules en funció de flaïres primàries.