



NATURALIS

BOLETÍN DE LA COORDINACIÓN DE
FÍSICA Y QUÍMICA

No. 29

agosto de 2018

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS



Contenido

1 **Química computacional**

Ayesha Sagrario Román García

5 **Nuevo material para el siglo XXI. “Chip” molecular**

Antonia del Carmen Pérez León

Química computacional

La Química computacional es una rama de la Química que surgió en las grandes compañías farmacéuticas de forma paralela al desarrollo exponencial de la computación en los años ochenta; también se puede decir, que surge de la necesidad de obtener resultados más precisos de las ecuaciones que se habían desarrollado a partir de la Ecuación de Schrödinger para la Química Cuántica y es ampliamente utilizada desde hace varias décadas en el diseño de nuevos medicamentos y materiales.

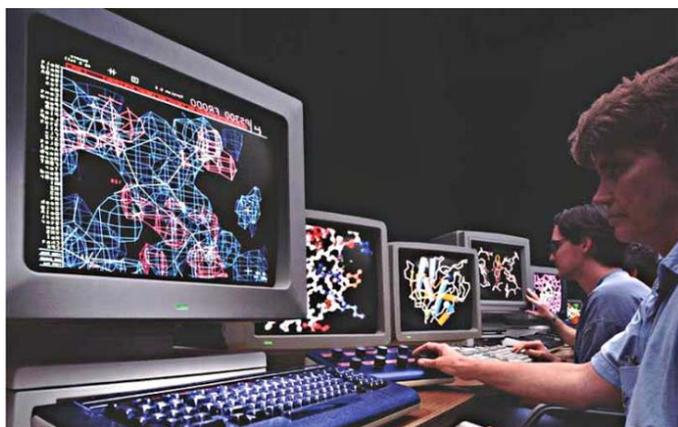
La Química computacional utiliza teorías, conceptos y modelos de la Química teórica, basados en tratamientos físicos de la materia provenientes de la física clásica, cuántica y la mecánica estadística, incorporados en software científico especialmente diseñado para calcular

la estructura o las propiedades estáticas y dinámicas de moléculas y agregados moleculares en estado gaseoso y en solución y de cuerpos sólidos. Según Cuevas (2005), mientras sus resultados complementan la información que puede obtenerse en experimentos químicos, pueden, en otros casos, predecir fenómenos químicos no observados, orientando el diseño de nueva actividad experimental o sustituyendo la ausencia de otro conocimiento empírico en problemas donde el diseño experimental tiene asociado un alto costo económico o que no pueda llevarse a cabo de forma experimental.

Mientras que la Química teórica permite el desarrollo de modelos para describir cualquier sistema químico, independientemente de su

complejidad, la Química computacional pretende brindar las técnicas operacionales para resolver los modelos teóricos y para probar su validez mediante la comparación simultánea con los datos experimentales.

La Química computacional también es utilizada como técnica de aprendizaje por lo que guarda relación con otras áreas como la biología, la mecánica y la física, ya que es a través de ella que se puede obtener la especificación molecular necesaria para detallar un sistema, pues se emplea para definir los estados intermedios de reacción, los ángulos de enlace y las características electrónicas de las moléculas, entre otros. Se puede decir que utiliza una gran cantidad de métodos matemáticos y estos pueden dividirse en dos grupos: la mecánica molecular y la mecánica cuántica.



Uso de la Química Computacional para experimentación.

Historia

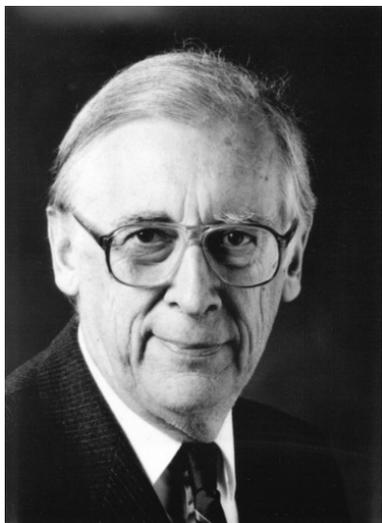
El desarrollo de la Química Computacional surge cuando en 1925 el físico austríaco Erwin

Schrödinger formula su famosa ecuación, capaz de explicar el espectro de los sistemas hidrogenoides dando origen a la Química Cuántica. Lo anterior, dio origen a la formulación de métodos para la aproximación a la solución de la ecuación de Schrödinger, con la finalidad de poder aplicarse a sistemas que no fueran monoeléctricos, lo cual forzaba al uso de la experimentación para que los resultados pudieran ser validados.

Debido a la complejidad de los cálculos, fue necesario el desarrollo de métodos computacionales que de acuerdo a Giacomantone(2016), consisten en el diseño y la elaboración de algoritmos mediante modelos y herramientas matemáticas como el análisis numérico que puedan simular o recrear procesos más complejos de la realidad, que pudieran desarrollar las aproximaciones necesarias hasta la exactitud que se requería para poder llevarse a la experimentación.

Fue entonces que, de acuerdo a Mo (2011), en los años 40 se desarrollan los primeros sistemas que podían dar aproximaciones valiosas a un método que llamaron ab initio; pero no fue hasta 1956 que el MIT usando un conjunto de funciones, aplicó el método ab initio para moléculas diatómicas. Debido a esto, John A. Pople recibió en 1998 el premio nobel de Química, por sus aportaciones a la Química cuántica dándole la característica de ciencia

predictiva y dotó a la comunidad científica en general con una potente herramienta para interpretar y predecir las propiedades de los compuestos químicos.



John A. Pope

Aplicaciones

Con la ayuda de la Química computacional se pueden obtener diversos cálculos, que han ayudado al desarrollo de nuevos materiales, fármacos, entre otros, sin involucrar costos o experimentación innecesaria. Algunos ejemplos son los siguientes:

- I. Los arreglos geométricos de los átomos que corresponden a moléculas estables y a estados de transición.
- II. Las energías relativas de varias moléculas.
- III. Momento dipolar, polarizabilidad.
- IV. Propiedades espectroscópicas como corrimientos químicos y constantes de acoplamiento, frecuencias vibracionales.
- V. Propiedades termoquímicas.

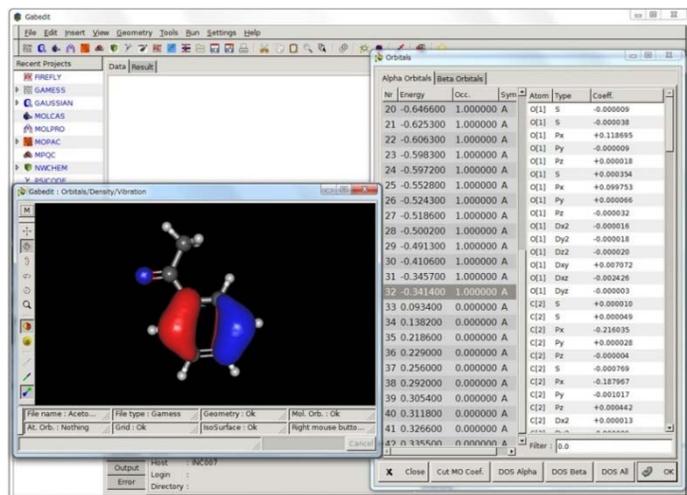
- VI. La rapidez con la que sucede una reacción.
- VII. La dependencia de algunas propiedades, como la estructura molecular con el tiempo.

Por lo cual, de acuerdo a Cuevas (2005), no debe considerarse a la Química computacional como una contraposición de las técnicas tradicionales de experimentación, sino como un apoyo ya que existen experimentos que podrían llegar a ser sumamente peligrosos e incluso imposibles de llevar a cabo en un laboratorio, o muy costoso o que requiera mucho tiempo y por lo tanto no podrían ser estudiados con métodos de laboratorio como los conocemos.

Otra aplicación de la Química computacional según González (2016), es que permite identificar y optimizar compuestos de elevada afinidad como potenciales candidatos a fármacos. Más recientemente, la Química computacional se ha extendido al diseño de compuestos que presenten no sólo una elevada afinidad por su receptor, sino también una optimización de sus propiedades farmacéuticas, que aseguran un balance en la absorción, distribución y metabolismo del fármaco, junto a su excreción y toxicidad.

De acuerdo a Medina (2015), actualmente, ya existe en las Universidades de nuestro país, el diseño de fármacos asistido por computadora, y aunque estos sistemas computacionales son de gran ayuda, siempre se encuentran

supervisados por los expertos en el tema; de lo cual se puede inferir que la Química Computacional es un área multidisciplinaria que incluye a expertos de diversas áreas del conocimiento.



Software Libre Gabedit para Visualización y Diseño Molecular

El programa Gabedit es uno de los más empleados para quienes trabajan en la Química computacional, ya que además de ser libre, es el más compatible con otros programas que trabajan con los algoritmos más conocidos y es capaz de proporcionar una interfaz gráfica al usuario.

Conclusiones

La Química computacional se ha convertido en una poderosa herramienta capaz de realizar y predecir comportamiento de los compuestos que con la Química teórica no se podría haber logrado; a pesar de ser únicamente una herramienta complementaria para los

profesionales de la Química que se desempeñan en las áreas en donde ha intervenido como la Química Cuántica, la espectroscopia, fenómenos de astroquímica, el estudio del ADN, entre otros, se ha convertido también, en una tarea multidisciplinaria, en la cual los profesionales en el área de Computación, tienen grandes campos de trabajo en la que pueden aportar sus conocimientos para mejorar lo que ya existe o crear algo nuevo.

Para que un profesional de la Ingeniería pueda participar en la creación, adaptación o diseño de un programa que realice tareas novedosas y ayude a los Químicos Computacionales en sus diversas tareas, se necesita que conozca al menos los conceptos básicos de Química tal como se imparte actualmente para los alumnos de Ingeniería en Computación de nuestra Facultad; lo anterior, es una muestra clara de que actualmente no existe una disciplina o profesión que se desempeñe de forma aislada a todas las demás, pues los nuevos retos a los que se enfrentan las diferentes instituciones que realizan el desarrollo científico del país, requieren de los conocimientos de profesionales de diferentes áreas de conocimiento.

Referencias

1. Giacomantone, J., Bria, O., Lorenti, L., De Gustie, A. (2016). Modelos y Métodos Computacionales en Ingeniería. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas. Buenos Aires, Argentina.

2. Gonzalez, A. (2016). Química Computacional en el Diseño de Fármacos. Revista Life Sciences Lab marzo- abril, pp. 28-31.
3. Medina J., Fernandez, E., Naveja, J. (2015). Avances en el diseño de fármacos asistido por computadora. UNAM. Educación Química No. 26, pp. 180-186.
4. Mo, O., Yáñez, M. (2011). La química computacional en la nueva frontera. Arbor Ciencia, Pensamiento y Cultura, pp. 143-155.
5. Cuevas, G. (2005). Química Computacional. Revista Ciencia Número abril- junio, UNAM, pp. 33-42.
6. Recuperado de: https://es.wikipedia.org/wiki/Computaci%C3%B3n_ci
7. Recuperado de: <https://www.definicion.xyz/2018/05/quimica-computacional.html>, Fecha de consulta: 04 de agosto de 2018.
8. Recuperado de: <http://gabedit.sourceforge.net/>, Fecha de consulta: 04 de agosto de 2018.

Ayesha Sagrario Román García

ayesha_roman@yahoo.com.mx

Profesora de la Facultad de Ingeniería de la UNAM

Nuevo material para el siglo XXI. “Chip” molecular

Actualmente la Química de materiales es una de las disciplinas que, en algunas de las universidades más importantes del mundo, está ligada a la Ingeniería. Durante el siglo XX, el desarrollo de esta ciencia produjo materiales, hoy cotidianos, como la cerámica de altas prestaciones, los cristales líquidos, los polímeros adhesivos y los chips de silicio (Si), entre otros.

La ciencia de materiales es un campo multidisciplinar que estudia los conocimientos fundamentales sobre las propiedades físicas macroscópicas de los materiales y los aplica en varias áreas de la ciencia y la ingeniería, consiguiendo que éstos puedan ser utilizados en obras, máquinas y herramientas diversas, o convertidos en productos necesarios o requeridos por la sociedad, que incluye elementos de la Química y Física, así como de

las ingenierías mecánica, civil, eléctrica, computación o ciencias ambientales.

Los chips de silicio son ampliamente utilizados en muchos tipos de equipos electrónicos. Ellos incluyen computadoras, teléfonos celulares, televisores, automóviles, calculadoras, entre otros. En la actualidad, los chips se construyen capa por capa, a través de un proceso denominado fotolitografía. Esto debido a que el silicio presenta un amplio rango de propiedades electromecánicas útiles, como pueden ser la elasticidad y la piezoelectricidad. El micromecanizado del silicio permite, por su estrecha relación con la microelectrónica, una fácil integración de la electrónica con los microsistemas. Todos estos motivos han propiciado que aun actualmente la mayor parte de microsistemas se fabriquen de silicio y con

procesos de fabricación derivados de la industria del semiconductor.

A pesar de los grandes progresos en el conocimiento y en el desarrollo de los materiales en los últimos años, el permanente desafío tecnológico requiere materiales cada vez más sofisticados y especializados. Tales como los chips moleculares, en los que el silicio (Si) se reemplazaría por moléculas orgánicas, algunas de las cuales responden a la luz. Es decir, los chips moleculares, usarían fotones en vez de electrones, tornándose mucho más rápidos, que permitirán escribir, borrar y leer la información, en forma de puntos o líneas continuas, de forma estable y en condiciones ambientales. Esto lo convierte en un dispositivo de memoria molecular no volátil, es decir, que no pierde los datos almacenados al interrumpirse la corriente eléctrica.

Los dispositivos de “memoria molecular” podrían ofrecer una capacidad de almacenamiento muy superior a la de los ordenadores actuales y a mucho menor costo. Los actuales dispositivos microeléctricos de silicio tienen un tamaño mínimo de 180 [nm], más o menos una milésima del grosor de un cabello. Pero en la electrónica molecular los componentes más pequeños pueden llegar a reducirse a un solo nanómetro, lo que permitiría tener más de mil procesadores en el espacio que ahora ocupa uno solo de los actuales.

Las “memorias moleculares” necesitan de sustancias químicas capaces de permanecer estables en al menos dos estados, de manera que pueda guardarse información codificada en formato binario. En un soporte tradicional, como un disco duro, esta función la realizan los grupos de moléculas que cubren la superficie de los discos internos, capaces de ser magnetizados en uno u otro sentido.

Estos cambios tendrán un profundo impacto económico. Los chips actuales se producen en plantas que cuestan miles de millones de dólares y que utilizan ondas de luz para grabar capas sucesivas de circuitos en un sustrato de silicio. Los nuevos chips moleculares, en cambio, se podrán fabricar usando simples reacciones químicas que conecten un elevado número de componentes de tamaño molecular por un bajo costo.

Uno de estos chips moleculares es de una molécula llamada rotaxano. Es una molécula diminuta con forma de mancuerna capaz de actuar como un interruptor molecular, es a grandes rasgos una molécula que es capaz de activar o desactivar determinados componentes celulares y, en consecuencia, iniciar o frenar una función o efecto.

Un rotaxano [del latín: rota (rueda) y axis (eje)] consiste en una molécula lineal (eje), la cual se

encuentra dentro de una molécula cíclica (rueda), con los extremos de la molécula lineal taponados por grupos voluminosos, de tal

manera que se previene la disociación de la estructura (figura 1).

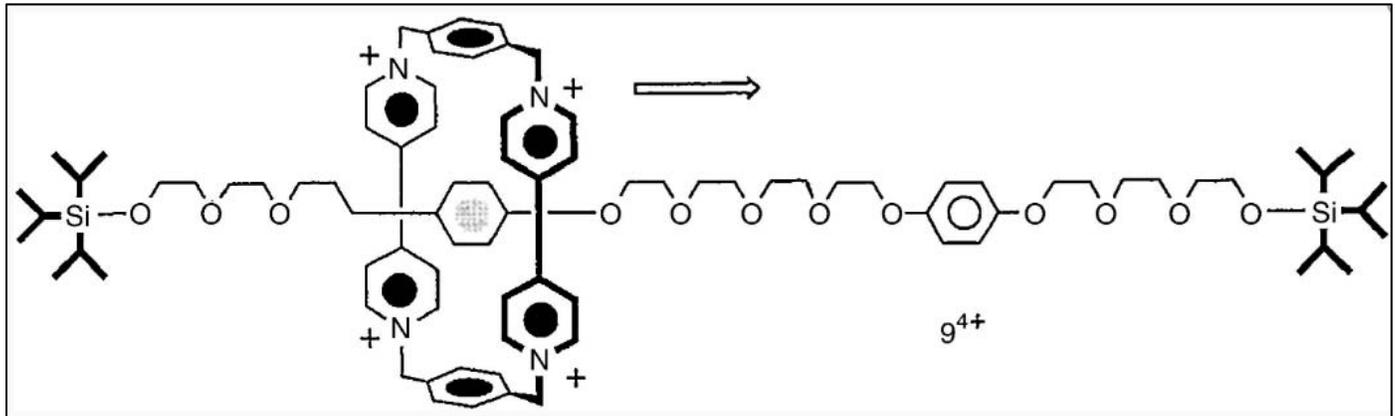


Figura 1: Balzani, Gómez-López y Stoddart (1998)

Los rotaxanos son potencialmente máquinas moleculares que se podrían usar en electrónica molecular como interruptores lógicos o transportadores. Su funcionamiento se basaría en el movimiento del macrociclo respecto a la molécula central (la del eje y las “pesas”). El macrociclo puede girar alrededor del eje de la molécula o puede deslizarse a lo largo del mismo. Controlar la posición del macrociclo mediante agentes químicos como fotoquímicos permitiría que el rotaxano pueda funcionar como interruptor molecular pues cada posible ubicación del macrociclo correspondería a un estado diferente.

Una molécula de rotaxano mide menos de 1 [nm] (10^{-9} [m]), es decir, una millonésima de milímetro, y se espera que esta molécula, que es capaz de responder a órdenes binarias, pueda reemplazar

en un futuro los circuitos integrados, debido a su mínimo tamaño y gran capacidad de almacenamiento de datos. Procesará la información con una velocidad cien mil millones de veces superior a la de un ordenador actual.

Debido a su respuesta a las órdenes binarias permitirá sustituir al chip como componente básico, lo cual implica una amplia gama de aplicaciones tecnológicas.

También se pueden usar como nanomemorias, ya que se les puede hacer cambiar de conformación aplicándoles un voltaje positivo con la punta de la sonda de un microscopio de efecto túnel.

El trabajo representa un paso hacia delante en el camino hacia la fabricación de dispositivos basados en moléculas orgánicas, lo que

permitiría avanzar hacia la miniaturización más allá de lo permitido hasta ahora por la tecnología del silicio. Se prevé que se podrá fabricar computadoras del tamaño de una partícula de polvo y miles de veces más potentes que las existentes. De momento, se ha conseguido simular el cambio de una molécula, mediante su rotura, pero falta crear moléculas que se curven sin romperse.

Este tipo de aplicaciones se han trabajado ampliamente en los últimos años y se ha hecho un gran avance, pero aún es muy temprano para asegurar su efectividad y si serán capaces de cumplir las expectativas que han generado. La tecnología permite que nuestro mundo cambie día a día. Pero los verdaderos protagonistas son

las personas que hay detrás de la tecnología...
¡Los ingenieros!

Referencias:

1. Coronas Ceresuela, J. (2013). Química básica para Ingenieros. Prensas de la Universidad de Zaragoza. 1ra. Edición. Zaragoza, España.
2. V. Balzani, M., Gómez-López, J. F. Stoddart., Molecular machines, Accounts of Chemical Research, 31 (1998), pp. 405-414.
3. Un nuevo "chip" molecular. [Internet] Disponible en https://elpais.com/diario/2000/08/19/sociedad/966636002_850215.html [Recuperado el 20 de junio de 2018].
4. Rotaxanos: Máquinas moleculares. [Internet] Disponible en <https://triplenlace.com/2014/07/30/rotaxanos-maquinas-moleculares/> [Recuperado el 20 de junio de 2018].

Antonia del Carmen Pérez León

pela72@yahoo.com.mx

Profesora de la Facultad de Ingeniería de la UNAM

"Cualquier tecnología suficientemente avanzada es indistinguible de la magia"

Arthur C. Clarke (1917-2008) Escritor y científico británico.

"El verdadero progreso es el que pone la tecnología al alcance de todos"

Henry Ford (1844-1929) Industrial estadounidense.

"Toda la tecnología tiende a crear un nuevo entorno humano... Los entornos tecnológicos no son meramente pasivos recipientes de personas, son procesos activos que reconfiguran a personas y a otras tecnologías similares"

Marshall McLuhan (1911-1980) Filósofo, erudito y profesor canadiense.

El contenido de los artículos publicados en este boletín es responsabilidad exclusiva de los autores.

Dudas o comentarios: velasquez777@yahoo.com.mx

Editor: M. en C. Q. Alfredo Velásquez Márquez