

QUÍMICA COMPUTACIONAL

COMPUTATIONAL CHEMISTRY

María Corazón Flores Bautista (1)

Ernesto Chigo Anota (1)

Dulce Elena Letras Luna (2)

ISSN 2448-5829

Año 11, No. 31, 2025, pp. 20 - 27

<https://orcid.org/0000-0002-0683-4079>

<https://orcid.org/0000-0001-6037-7123>

<https://orcid.org/0000-0002-6866-2866>

FECHA DE RECEPCIÓN 08/07/2024

FECHA DE REVISIÓN 2/12/2024

FECHA DE PUBLICACIÓN 20/01/2025

- (1) Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Facultad de Ingeniería Química. Área de materiales: química teórica computacional. Ciudad Universitaria. Puebla. México. C.P. 72570. Teléfono: 222 229 5500
- (2) Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Facultad de Ciencias Químicas, ICUAP. Departamento de Biología y Toxicología de la Reproducción. Ciudad Universitaria. Puebla. México. C.P. 72570. Teléfono: 222 229 5500
corazon.flores@alumno.buap.mx
ernesto.chigo@correo.buap.mx
dulce.letras@alumno.buap.mx

Resumen

La química computacional es el campo de la resolución de ecuaciones matemáticas complejas de métodos mecánicos-cuánticos con computadoras. Es un tema antiguo y joven al mismo tiempo, antiguo por la historia de los métodos que representan los principios de este campo y joven porque está conectado con los rápidos avances en hardware y software. Actualmente, la química computacional se ha convertido en una herramienta esencial para estudiar y explicar problemas en la mayoría de las ramas de la química. Curiosamente, la química computacional ha ido más allá de ser una herramienta complementaria para los resultados experimentales. Para ahorrar tiempo, esfuerzo y dinero, los químicos necesitan realizar cálculos computacionales antes de disolver los productos químicos en disolventes e instalar el reflujo y el condensador. En la industria, la química computacional se ha convertido en un área importante para desarrollar nuevos productos y ahorrar el alto costo del ensayo y error.

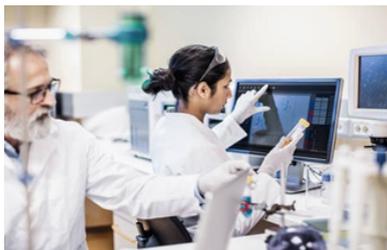
Palabras clave: Química; Computación; Tecnología; Teórico; Desarrollo; Aplicaciones.

Abstract

Computational chemistry is the field of solving complex mathematical equations by using quantum-mechanical methods with computers. It is both old and young due to the history of the methods that represent this field's principles and the rapid advances in computer hardware and software. Today, computational chemistry has become an essential tool for studying and explaining problems in most branches of chemistry. Interestingly, computational chemistry has gone beyond being a complementary tool for experimental results. To save time, effort, and money, chemists need to perform computational calculations before dissolving chemicals in solvents and installing the reflux and condenser. In industry, computational chemistry has become an important unit to develop new products and save the expensive cost of trial and error.

Introducción

La química computacional se ha aplicado con éxito en las investigaciones de diversas propiedades físicas y químicas de diferentes materiales con el fin de tener una comprensión clara a nivel electrónico, atómico y molecular. Por otro lado, el progreso actual del hardware informático junto con el desarrollo de software novedoso hace posible tener investigaciones de sistemas complejos con resultados mucho más realistas.



Química computacional un nuevo enfoque de la investigación y aplicaciones de la industria. <https://www.istockphoto.com/es/search/search-by-asset?assetid=1309776504&assettype=image>

Por lo tanto, al integrar nuestras metodologías computacionales recientemente desarrolladas con el avance de las técnicas computacionales, realizamos simulaciones teóricas de materiales y procesos de importancia en diferentes campos, como en la industria, fisiología, química, farmacología, cosmética, entre muchas más. Se han aplicado programas de química computacional integrada a muchas áreas de investigación de materiales de importancia práctica y económica (Selvam, et al. 2006).

La química teórica o computacional tiene como objetivo desarrollar la teoría química y aplicar el cálculo numérico y la simulación para revelar el mecanismo detrás de los fenómenos químicos complejos a través de la teoría cuántica y la mecánica estadística. La computación es el tercer pilar de la investigación científica junto con la teoría y la experimentación. La computación permite a los científicos probar, descubrir y construir modelos/teorías de los fenómenos químicos correspondientes. La química teórica y computacional

ha avanzado a una nueva era debido al desarrollo de instalaciones computacionales de alto rendimiento y enfoques de inteligencia artificial.



La química teórica permite optimizar recursos gracias al uso de herramientas computacionales. <https://www.pexels.com/es-es/foto/codigo-html-270366/>

La tendencia a fusionar la teoría estructural electrónica con la dinámica química cuántica y la mecánica estadística es de creciente interés debido al rápido desarrollo de simulaciones dinámicas sobre la marcha para sistemas complejos más la teoría estructural electrónica de baja escala (Abdallah, 2016). Otro problema desafiante radica en la transición del orden al desorden, de la termodinámica a la dinámica y del equilibrio al no equilibrio. A pesar de un surgimiento cada vez más rápido de avances en el poder computacional, aún deben desarrollarse criterios detallados para bases de datos, estrategias efectivas de intercambio de datos y flujos de trabajo de aprendizaje profundo (Lu y Shuai, 2021).

La química computacional es actualmente un conjunto simultáneo de cálculos ab initio, simulación, aprendizaje automático y estrategias de optimización para describir, resolver y predecir datos químicos y fenómenos relacionados. Éstos incluyen búsquedas aceleradas de literatura, análisis y predicción de propiedades químicas, físicas y cuánticas, estados de transición, estructuras químicas, reacciones químicas y también nuevos catalizadores o candidatos a fármacos.



La aplicación de la química computacional permite el desarrollo de experimentos para el desarrollo de productos, fármacos, vacunas entre muchos otros en menor tiempo y a un menor costo. <https://www.pexels.com/es-es/foto/tecnologia-blanco-negocio-mercado-5878482/>

La información producida por la combinación de la química y el aprendizaje automático, a través de análisis basados en datos, predicciones de redes y monitoreo de sistemas químicos, permite (i) impulsar la capacidad de comprender la complejidad de los datos químicos, (ii) agilizar y diseñar experimentos, (iii) descubrir nuevos objetivos moleculares y materiales, y también (iv) planificar o repensar los próximos desafíos químicos. De hecho, la optimización engloba todas estas tareas directamente (Cova y País, 2019).

Desarrollo

En las últimas décadas, los recursos computacionales se han vuelto cada año más poderosos y, además, el desarrollo de la metodología ha llevado a técnicas mucho más eficientes. Los estudios experimentales y computacionales combinados generalmente brindan una perspectiva más amplia de un problema químico y lo analizan desde diferentes ángulos y perspectivas que los estudios experimentales independientes no pueden considerar. Por lo tanto, los estudios computacionales proporcionan información adicional importante junto con la experimentación y ayudan en la interpretación de los datos experimentales. Además, con la química cuántica computacional se pueden investigar intermediarios catalíticos de vida corta, nube electrónica de átomos

y sus patrones de reactividad, lo que, junto con el trabajo experimental, puede explicar las distribuciones de productos y las velocidades de reacción. Además, el trabajo computacional puede hacer predicciones que alientan futuros estudios experimentales.

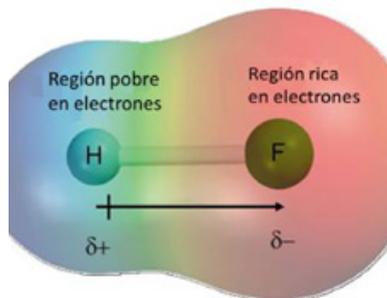


Figura 1. Representación de las nubes electrónicas de los átomos con diferente electronegatividad: molécula polar (rojo: mayor carga negativa, azul: mayor carga positiva) (autoría propia).

Esta colaboración de experimento y teoría ha dado lugar a un gran campo de investigación, donde los teóricos y los experimentalistas trabajan juntos. Como resultado de eso, ya no es raro que los estudiantes de doctorado y los investigadores postdoctorales realicen una combinación de experimento y computación para un solo proyecto multidisciplinario. Sin embargo, aunque muchos grupos basados en la experimentación están comenzando a utilizar métodos de química computacional, casi de manera rutinaria, hoy en día existen algunas advertencias serias con los métodos y técnicas, a menudo, estos estudios computacionales no se pueden realizar a través de procedimientos de "caja negra", sino que requieren la supervisión de expertos (Visser, 2013).

La química computacional es el campo de la química que utiliza aproximaciones matemáticas y programas informáticos para resolver problemas de interés químico.

Se denomina Química Computacional a la obtención de información estructural de sistemas químicos por medio de cálculos matemáticos basados en leyes fundamentales de la física (Young, 2001). La química computacional busca caracterizar

y predecir la estructura y estabilidad de los sistemas químicos (Lipkowitz, 2001), estudiando diferencias de energía entre diferentes estados para explicar propiedades espectroscópicas y mecanismos de reacción a nivel atómico (Figura 2).

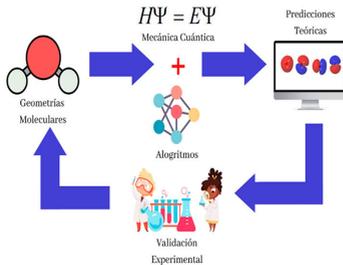


Figura 2. Esquema simplificado de cómo funciona la investigación en la Química Computacional. Algunas geometrías moleculares construidas a partir de visualizadores moleculares se utilizan para hacer predicciones teóricas de las propiedades estructurales, químicas, ópticas y electrónicas de las moléculas utilizando programas que incluyen la formulación cuántica. Los resultados son comparados con experimentos, validando o rechazando las predicciones teóricas. Después, los pronósticos anteriores permiten dar guía a nuevos experimentos. Mecanismo de reacción a nivel atómico. <https://avanceyperspectiva.cinvestav.mx/de-la-quimica-computacional-a-la-computacion-cuantica/>

Los premios nobel de 1998 y 2013 han sido otorgados a esta especialidad. El Nobel de química de 1998 lo recibieron John Pople (Northwestern University) y Walter Kohn (University of California at Santa Barbara). John Pople por su contribución al primer programa que realizaba cálculos ab initio y su desarrollo para permitir la aplicación de éstos a la resolución de problemas. John Pople es denominado el padre de la química computacional de aplicación generalizada, el primer programa de cálculos Ab initio desarrollado fue Gaussian 70 (Cuevas, 2003). Walter Kohn fue premiado por el desarrollo de la teoría funcional de densidad, conocida como DFT, de gran aplicación en el campo de la química teórica (Cuevas, 2003). En 2013 los ganadores del Nobel fueron Arieh Warshel (University of Southern California), Michael Levitt (Stanford University)

y Martin Karplus (Harvard University). Su investigación se centró en el desarrollo de un modelo que combina la mecánica cuántica y la mecánica molecular y da un significado físico a la unión entre zonas, permitiendo realizar cálculos en grandes proteínas (Nobel Prize in Chemistry 2013).

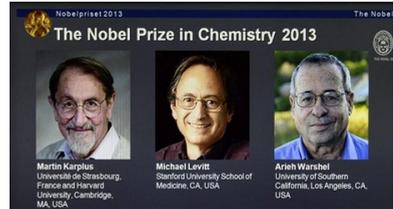


Figura 3. Galardonados con el Nobel de Química por el desarrollo de modelos multi rangos en el equipo de cómputo que permiten entender y predecir procesos químicos complejos. (Nobel Prize in Chemistry 2013). <https://vovworld.vn/es-ES/noticias/tres-cientificos-reciben-el-premio-nobel-de-quimica-2013-186749>.
VOV

Los principales tipos de métodos usados en los cálculos son: mecánica molecular y mecánica cuántica. A su vez, los métodos de mecánica cuántica incluyen métodos semi-empíricos y métodos ab initio. Los métodos de mecánica molecular y semi-empíricos poseen algunas ventajas sobre los métodos ab initio. La más importante es la rapidez. La exactitud de la mecánica molecular o de los métodos semi-empíricos depende de los parámetros usados. En muchos casos tenemos que encontrar los parámetros antes de comenzar los cálculos.

Los métodos ab initio son métodos computacionales basados en química cuántica, la IUPAC los define como métodos de cálculo de mecánica cuántica independientes de cualquier experimento usado para la determinación de las propiedades fisicoquímicas fundamentales. Estos métodos están basados en el uso de la ecuación completa de Schrödinger para tratar todos los electrones de un sistema químico. Ab initio es un término en latín que significa "primeros principios". Los cálculos de ab initio se realizan, sin suposiciones adicionales ni parámetros determinados

experimentalmente. Los cálculos de los métodos Ab initio se basan en resolver el estado electrónico de un sistema a partir de la ecuación de Schrödinger y de esta manera, obtener varias propiedades de las especies químicas (Nic, 2002).

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) (Peter, 2011) aplicada a sistemas electrónicos es un procedimiento variacional alternativo a la solución de la ecuación de Schrödinger, donde el funcional de la energía electrónica es minimizado con respecto a la densidad electrónica. Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born-Oppenheimer. La teoría fue extendida posteriormente al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, desarrollándose así la Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo (TD-DFT, por sus siglas en inglés), la cual permite estudiar sistemas en estados excitados. Los resultados obtenidos a partir de la DFT son satisfactorios. No se requiere ningún tipo de parámetro adicional ni ajuste obtenido de resultados experimentales. Toda esta tecnología tiene muchos tipos de aplicaciones en diferentes ramas de la vida cotidiana, desde el área de investigación hasta la industria, tanto como enfoques ambientales.

Como el diseño tradicional de fármacos requiere una gran cantidad de tiempo de investigación y gastos de desarrollo, los métodos computacionales en auge, que incluyen la biología computacional, el diseño de fármacos asistido por computadora y la inteligencia artificial, tienen el potencial de acelerar la eficiencia del descubrimiento de fármacos al minimizar el tiempo y el costo financiero. En los últimos años, los métodos computacionales se están utilizando ampliamente para mejorar la eficacia y efectividad del descubrimiento y la elaboración de nuevos fármacos, lo que ha llevado a la aprobación de muchos nuevos fármacos para su comercialización (Zhang, et al. 2022) (Figura 4).

Descubrimiento y desarrollo de fármacos

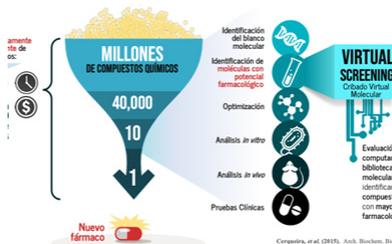


Figura 3. Galardonados con el Nobel de Química por el desarrollo de modelos multi rangos en el equipo de cómputo que permiten entender y predecir procesos químicos complejos. (Nobel Prize in Chemistry 2013). <https://vovworld.vn/es-ES/noticias/tres-cientificos-recipientes-del-premio-nobel-de-quimica-2013-186749>.
vov

En la química orgánica, la química computacional desempeña un papel indispensable en la elucidación de los mecanismos de reacción y los orígenes de diversas selectividades, como la quimio-, regio- y estereoselectividad. En consecuencia, la comprensión de mecanismos de reacción mejora la síntesis y ayuda al diseño racional de nuevos catalizadores (Zhang, et al. 2016) (Figura 5).

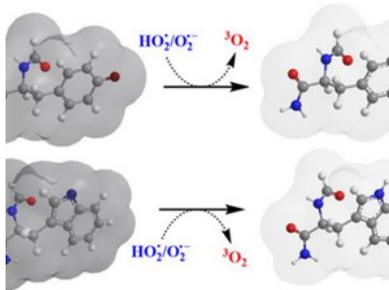


Figura 5. Mecanismos de reacción. <https://www.acs.org/content/dam/acsorg/events/spanish-webinars/slides/2020-11-18-radical-molecules.pdf>

Conclusiones

La química computacional es el campo de la resolución de ecuaciones matemáticas complejas de los métodos mecano-cuánticos con ordenadores. Es un tema antiguo y joven al mismo tiempo, antiguo por la historia de los métodos que representan los principios de este campo y joven porque está conectado con los rápidos avances en hardware y software de computadoras. Actualmente, la química computacional se ha convertido en una herramienta esencial para estudiar y explicar problemas en la mayoría de las ramas de la química. Es una herramienta complementaria para los resultados experimentales. Para ahorrar tiempo, esfuerzo y dinero. En la industria, la química computacional permite desarrollar nuevos productos, diseñar nuevos métodos, procesos, productos y evaluaciones que disminuyen la probabilidad de error. Así como las nuevas aplicaciones de la química computacional en el campo de la astrofísica, la biología, el diseño de fármacos y la nanotecnología, entre otras.

Conflicto de intereses

Los autores de este manuscrito declaran no tener ningún tipo de conflicto de interés.

Declaración de privacidad

Los datos de este artículo, así como los detalles técnicos para la realización del experimento, se pueden compartir a solicitud directa con el autor de correspondencia.

Los datos personales facilitados por los autores a RD-ICUAP se usarán exclusivamente para los fines declarados por la misma, no estando disponibles para ningún otro propósito ni proporcionados a terceros.

Agradecimientos

Especiales agradecimientos al Cuerpo Académico de Ingeniería en Materiales (BUAP-CA-177) y la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado (Beca: 100378777-VIEP2021).

Referencias

- Abdallah, H. (2016). Computation chemistry as a tool for academic and industrial chemists. . <https://doi.org/10.4172/2469-9764.C1.003>.
- Cova, T. Pais, A. (2019). Deep Learning for Deep Chemistry: Optimizing the Prediction of Chemical Patterns. *Frontiers in Chemistry*, 7. <https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00809>.
- Cuevas, G. C. (2003). Introducción a la química computacional. 968-16-7105-8.
- Lipkowitz, K. B. (2001). *Reviews in Computational Chemistry*. Weinheim: VCH.
- Lu, Y. Deng, G. Shuai, Z. (2021). Future directions of chemical theory and computation. *Pure and Applied Chemistry*, 93, 1423 - 1433. <https://doi.org/10.1515/pac-2020-1006>.
- Nic, e. a. (2002). *Gold Book. IUPAC Compendium of Chemical Terminology*. Triagle Park: Miloslav.
- Peter, W. A. (2011). *Molecular quantum mechanics*. Reino Unido: Oxford university press.
- Selvam, P. Tsuboi, H., Koyama, M. Endou, A. Takaba, H. Kubo, M. Carpio, C. Miyamoto, A. (2006). Computational chemistry for industrial innovation. *Reviews in Chemical Engineering*, 22, 377 - 470. <https://doi.org/10.1515/REVCE.2006.22.6.377>.
- Visser, S. (2013). Getting started in computational quantum chemistry. *Frontiers in Chemistry*, 1, 14. <https://doi.org/10.3389/FCHEM.2013.00014>.
- Young, D. (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques*. New York: Wiley-Interscience.
- Zhang, X., Chung, L., & Wu, Y. (2016). New Mechanistic Insights on the Selectivity of Transition-Metal-Catalyzed Organic Reactions: The Role of Computational Chemistry. *Accounts of chemical research*, 49 6, 1302-10. <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00093>.
- Zhang, Y., Luo, M., Wu, P., Wu, S., Lee, T., & Bai, C. (2022). Application of Computational Biology and Artificial Intelligence in Drug Design. *International Journal of Molecular Sciences*, 23. <https://doi.org/10.3390/ijms232113568>.