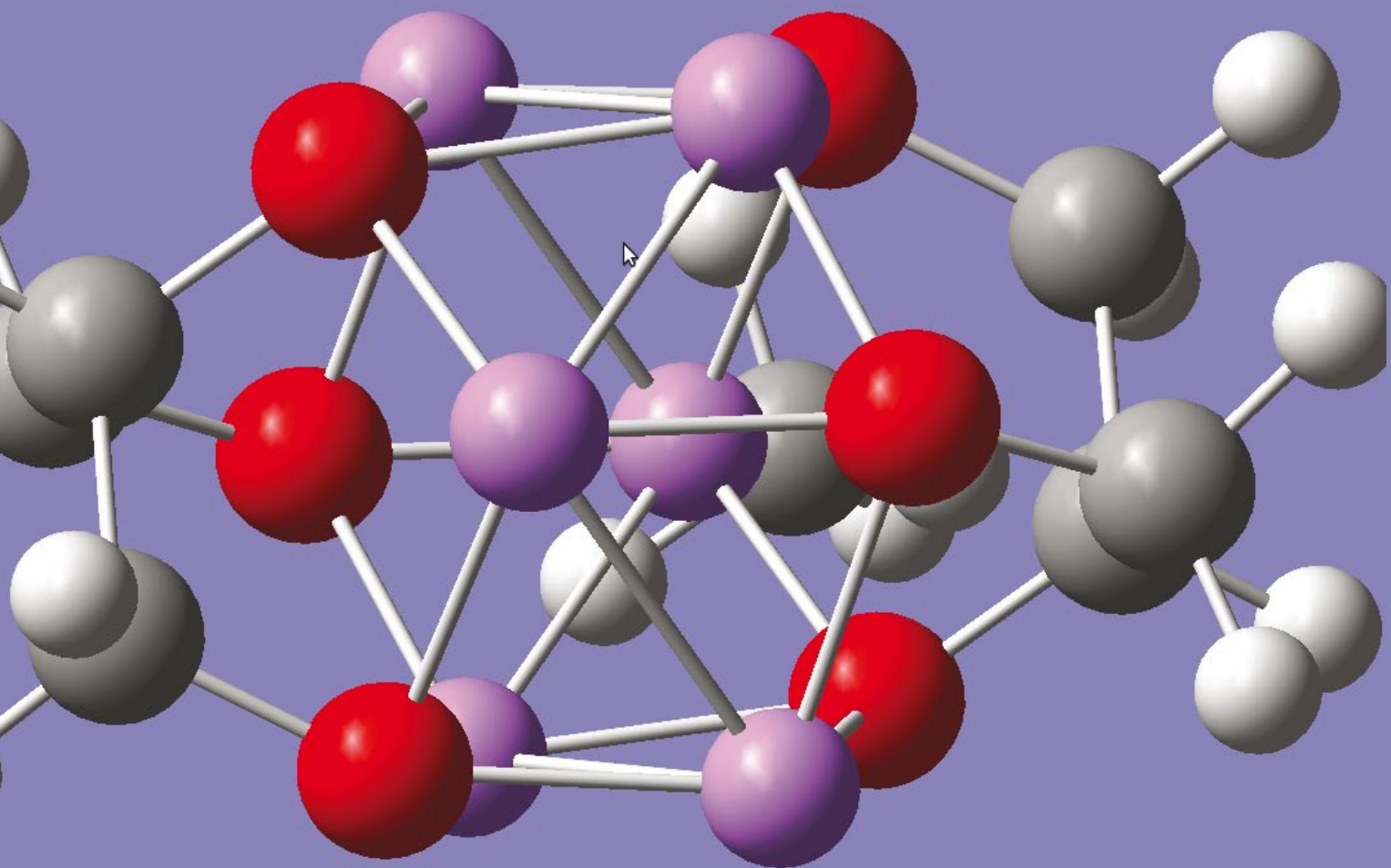


Por Sergio Urquijo Morales\*

# SOBRE ÁTOMOS Y MOLECULAS





*Las aplicaciones de la química computacional saltan a la vista si pensamos en que es una técnica poderosa para conocer los secretos de la materia. Algunos investigadores la utilizan para explorar teóricamente una estructura o proceso; otros, para predecir mejores aplicaciones industriales o ambientales, médicas, farmacéuticas.*

El efecto de un medicamento en nuestro cuerpo, la combustión del gas en la cocina, la purificación del agua que bebemos de la llave... todos estos procesos tan cotidianos están regidos por reacciones químicas, complejas interacciones de moléculas y átomos que cambian su posición y estructura, transfieren energía, se enlazan y se separan.

Desde hace 300 años, los químicos han probado que esas reacciones que transforman la materia están regidas por ecuaciones y pueden ser expresadas con números. A medida que la ciencia avanzaba en el conocimiento de la materia, especialmente en la escala de moléculas y átomos, la química se iba haciendo más y más compleja.

Mientras toma un café (una solución en agua de por lo menos 950 sustancias químicas, más un poco de sacarosa o azúcar común), el químico teórico Eduardo Chamorro habla de esa complejidad: "Grandes avances científicos, como la mecánica cuántica, mostraron que las leyes que rigen el comportamiento de los electrones y otras partículas subatómicas son muy diferentes a las que rigen nuestro mundo macroscópico. Se requieren herramientas matemáticas sofisticadas para conocer los procesos de la materia".

Considerando que todo proceso químico, incluso la disolución del azúcar en ese café, implica interacción de energía, electrones y átomos, surge la pregunta: ¿cómo calcular y predecir el comportamiento de estos sistemas, de estas reacciones, cuando para hacer los cálculos se requeriría muchísimo tiempo y toda una tropa de mentes muy capacitadas?

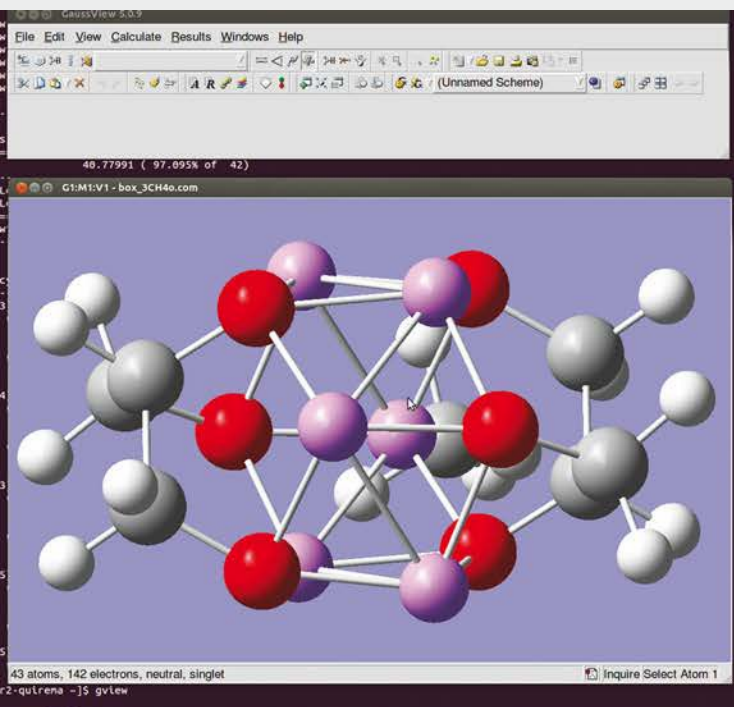
El problema lo solucionó un gran invento: el computador. Si bien desde hace siglos existen máquinas para calcular, fue el siglo XX el que vio nacer computadores potentes y cada vez más económicos. "Uno podría hacer los cálculos a mano, lápiz y papel, pero demoraría tanto que el trabajo no sería viable", indica Juan Fernando Espinal, químico e investigador del grupo Química de Recursos Energéticos -Quirema- de la Universidad de Antioquia. Incluso fue la misma teoría cuántica, tras el desarrollo del transistor, la que permitió que potentes computadores se hicieran pequeños, económicos y al alcance de muchos investigadores.

Andy Zapata, César Ibargüen, Edison Flórez y Norberto Moreno son jóvenes estudiantes de posgrado e investigadores del grupo Química Física Teórica. Los orienta Albeiro Restrepo, un químico que ha dedicado su vida a estudiar las bases teóricas de esta ciencia con ayuda de los computadores.



Cluster para cálculos computacionales  
Fotografías Vicerrectoría de Investigación





Conversar con ellos en su laboratorio, entre computadores y fórmulas, causa inmensa curiosidad ante las profundidades del tema que allí se explora.

“Tanto en la complejidad como en el tiempo necesario para hacer los cálculos, los computadores permiten un ahorro inmenso de recursos y energía, que hace viables muchas investigaciones antes impensadas”, comenta Edison.

Para ellos, y para muchos de los involucrados en la química computacional, fue una gran noticia el premio Nobel en Química de 2013, otorgado a Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel, por el desarrollo de modelos multiescala para sistemas químicos complejos. En 1998, el premio Nobel de Química fue otorgado a Walter Kohn, por el desarrollo de la teoría funcional de la densidad, y a John A. Pople por el desarrollo de métodos computacionales en química cuántica. Como lo indica el profesor Albeiro, “el área está ahora madura, es respetada y considerada una de las más prometedoras para la química y las ingenierías”.

### Del átomo a la molécula, y de ahí... al universo

Toda la materia del universo está compuesta de átomos, y frecuentemente estos forman moléculas. Unas aparentemente sencillas, como el agua, que es un átomo de oxígeno enlazado con dos de hidrógeno. Otras, como las proteínas que conforman nuestra piel, o los combustibles que nos dan energía, son una larga cadena de átomos de carbono enlazados con oxígeno, hidrógeno y (dependiendo del caso) otros elementos.

El átomo es complejo y fascinante: las partículas que lo componen (electrones, protones, neutrones y, más diminutos aún, los quarks) tienen curiosos comportamientos. Para conocerlos se requiere alta matemática. Hay que resolver centenares de operaciones de cálculo: derivadas, integrales, ecuaciones diferenciales... Además, para poder predecir cómo se comportarán esas partículas en el mundo real, puede ser muy útil elaborar un modelo: un tipo de simulación computacional que trata de replicar las condiciones de un átomo real.

“Sobre un modelo se pueden manipular las variables de tiempo, presión y valencias electrónicas”, explica Juan Fernando Espinal. “Así se conocen de antemano muchas propiedades y se predicen comportamientos”.

Para modelar y hacer cálculos sobre moléculas se requieren otros programas y otros conocimientos. Además, como las moléculas explican las diferentes

formas de la materia, es con ellas que se estudia y predice el comportamiento de las reacciones químicas.

En Quirema, por ejemplo, comenzaron estudiando el carbón mineral. “La estructura del carbón es muy compleja. En una misma mina puede haber varios tipos de carbón. No hay una estructura definida. Tiene heteroátomos, como azufre o nitrógeno, y puede tener también metales”, indica Juan Fernando. “Experimentalmente, proponer un mecanismo de reacción para materiales tan complejos es supremamente difícil. Por eso es tan útil tener apoyo computacional”.

Este investigador y su equipo se entregan a explorar los materiales que nos dan energía, para hacerlos más eficientes y menos contaminantes. Con los computadores, exploran los mecanismos de la catálisis: “Se trata de conocer cómo un elemento, un metal, por ejemplo, puede hacer que las reacciones del material carbonoso (como la combustión y la gasificación) sean más rápidas”.

### **El computador: una gran herramienta, no un investigador**

Desde su trabajo, que tiene tanto teoría como aplicación, Juan Fernando habla de una diversidad de usos: “Aunque se pueda definir la química computacional simplemente como una técnica para hacer cálculos que permitan obtener información química de una reacción, también se puede aplicar a un sistema de reacciones complejas, a perfiles de productos; a predecir cómo estas cambian en función del tiempo y la presión, lo que ya está más enfocado a la ingeniería”.

Así, en el grupo Química Física Teórica trabajan computacionalmente con fines teóricos, para conocer, por ejemplo, las estructuras del agua, pero saben que sus resultados pueden tener una inmensa gama de utilidades. “El trabajo en química computacional permite caracterizar y predecir propiedades como la estabilidad y viabilidad de una molécula, así como sus mecanismos de reacción”, cuenta Norberto Moreno. “Otros grupos pueden usar esa información para ensayar y diseñar, digamos, un medicamento”.

Como todo en la computación, sólo se obtienen buenos resultados si se le suministran al computador buenos datos. Además, es esencial que el investigador sepa qué es lo que la máquina está haciendo. “El computador resuelve las mismas operaciones matemáticas que se ven en cursos como cálculo

o álgebra lineal”, aclara Juan Fernando Espinal. “Para poder interpretarlos bien, se debe saber su significado, conocer esas matemáticas”.

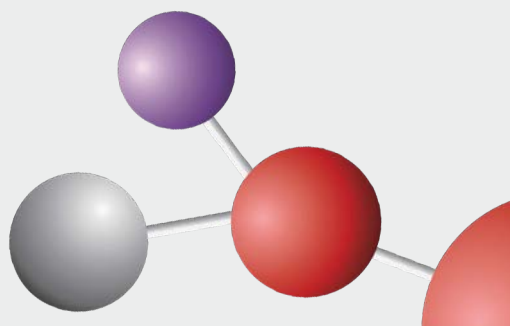
Al computador se le ingresan datos que son tomados de la observación en laboratorio, o de anteriores estudios: un tipo de molécula, una estructura, coordenadas y vectores. Luego se le modifican parámetros como temperatura y presión. El computador, si es bien operado y posee el software adecuado, entrega como resultados geometrías y energías. El investigador debe interpretarlos a la luz de su conocimiento y su experiencia.

Tras conocer los programas y entender bien los cálculos que se realizarán y sus interpretaciones, queda un último desafío: contar con la suficiente capacidad de cómputo. A veces hay que contar con el apoyo de otras instituciones, y ese contacto tiene muchas ventajas adicionales.

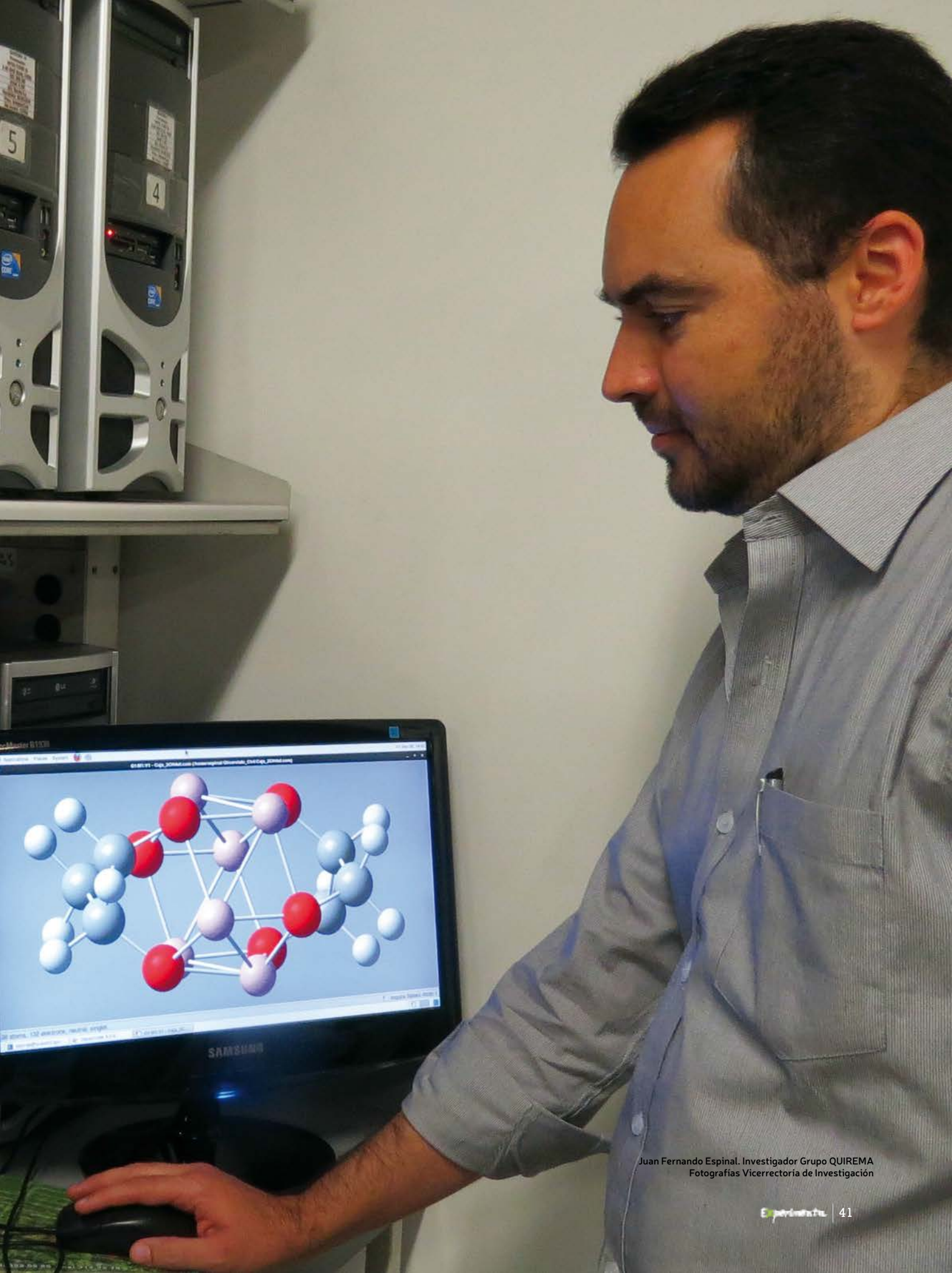
Como lo indica Andy Zapata, de Química Física Teórica, “la colaboración brindada por otras instituciones no solo aumenta nuestra capacidad tecnológica de computación, sino que genera intercambio de conocimiento y trabajo en red”. Esto lo corrobora, desde Quirema, Juan Fernando Espinal. “Aun cuando conseguimos equipos muy buenos, en la computación todo se desactualiza muy rápido, así que para nosotros es importante acceder a los potentes computadores de grupos aliados, lo que nos evita costos extra”.

Una de estas alianzas se hizo con la Universidad Andrés Bello, de Chile, gracias al contacto con el jefe del departamento de ciencias químicas de allí, Eduardo Chamorro, egresado de la Alma Mater con quien tomábamos el café al inicio de este viaje. Allí prestan a Quirema tiempo de computación para completar extensos procesos, y además discuten, hacen intercambios de investigación, se retroalimentan. Incluso en el sofisticado mundo de las matemáticas y los computadores, hacer ciencia implica conversar, visitarse, tomarse un café. ✖

\*Periodista







Juan Fernando Espinal. Investigador Grupo QUIREMA  
Fotografías Vicerrectoría de Investigación