

Editorial

Visión y Perspectivas de la Química Teórica o Computacional

Dos hitos han marcado en los últimos 25 años el desarrollo de la química teórica o computacional, y es la obtención del tan ansiado premio Nobel, en el año 1998 por parte de Walter Kohn y John A. Pople, y más recientemente en el año 2013 por parte de Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel. Esto aunado al vertiginoso desarrollo de la tecnología en el área de la computación, haciendo posible el uso de cada vez más potentes máquinas de supercómputo, o cómputo de alto desempeño, HPC por sus siglas en inglés.

Cuando se habla de la química teórica o computacional, suele considerarse en un espectro desde las aproximaciones clásicas como la mecánica molecular, pasando por métodos híbridos como Mecánica Cuántica/Mecánica Molecular (QMMM), la mecánica cuántica, métodos relativistas y multi configuracionales para la astroquímica, entre otras. Todas estas áreas de desarrollo han sido impulsadas por lo expresado anteriormente (incremento de nuevas teorías y aproximaciones, así como el incremento en el poder de cálculo) que aún se vienen implementando en diversos campos, y que a su vez nos permiten la aplicación de métodos teóricos y computacionales a sistemas cada vez más grandes, cuando consideramos el número de partículas o átomos involucrados o en el número de funciones base y métodos utilizados.

En el contexto de la actual pandemia del SARS-CoV2, hemos podido asistir a la publicación de diversos estudios teóricos en revistas que eran eminentemente experimentales, o en revistas de muy alto impacto como Nature, Lancet, o Science, entre otras. Esto nos pone frente al reto de la reproducibilidad de las observaciones experimentales mediante el uso de aproximaciones teóricas, y retroalimentarse mutuamente para explicar la fenomenología observada por los investigadores en todo el mundo. Una tendencia que se viene incrementando, en el proceso de revisión de artículos, cuando se propone nuevos mecanismos de interacción, los revisores solicitan un respaldo de simulaciones, o en su defecto una explicación mediante teorías de reactividad química (que podían ser la Teoría de Reactividad de Parr-Pearson o la Teoría de Átomos en Moléculas).

En el contexto nacional, recordemos que el campo de la química teórica o computacional, es realmente naciente, debido a la necesidad de especialistas formados adecuadamente para que puedan generar nuevos centros de investigación con este tipo de líneas de investigación, porque podemos caer en el mero utilitarismo de ser usuarios de softwares, sin un adecuado uso y conocimiento de la teoría y sus aproximaciones, como ocurrió a inicios de este milenio a nivel internacional, por lo cual existió una fuerte discusión en los círculos científicos para diferenciar a los teóricos de los usuarios computacionales, decantándose por el uso indistinto, ya que los usuarios deberían ser adiestrados en conocimiento a fondo de la teoría, y es en este sentido que nuestra pequeña comunidad nacional de investigadores en el área de la química teórica o computacional debiera ahondar en el conocimiento profundo de las diversas teorías y sus aproximaciones matemáticas que son la fuente y base para las implementaciones

computacionales y generar resultados cada vez más cercanos a los datos experimentales, y que mediante herramientas como la termodinámica estadística podemos generalizarla adecuadamente al mundo macroscópico.

Por último, debemos estar conscientes de que al ser un área en la que la tecnología que se requiere no es muy costosa, en comparación con otras áreas de la química, podría ser un nicho adecuado para poder empezar a formar grupos de investigación que empiecen a aportar con nuevas publicaciones de circulación nacional e internacional y que puedan poner a nuestras universidades a la altura del concierto de los ránquines internacionales.

Dr. Badhin Gómez Valdez

Centro de Investigación en Ingeniería Molecular
Universidad Católica de Santa María