

Uso del Software computacional en Física, Química y Ciencias de Materiales: El modelado

computacional

Resumen

Complementamos nuestra visión de los llamados Laboratorios Virtuales expandido al uso de programas computacionales en la Química, Física y Ciencias de Materiales. y así diversificarlas como parte complementaria y reemplazado del experimento.

Palabras Claves: Laboratorios virtuales, programas computacionales.

I Introducción

Anteriormente dimos a conocer la importancia que tiene el uso del Modelado Computacional en los llamados Laboratorios Virtuales (Chigo Anota 2002:a) desde dos puntos de vista como lo es la Química Cuántica Computacional (QCC) y la Física del Estado Sólido Computacional (FESC, Chigo Anota 2002:b). El uso de este tipo de herramienta tan variada y cada vez más diversificada ha crecido, debido al software y hardware cada vez más potente, ejemplo de esto son: la velocidad de procesamiento, el uso de computadoras paralelizables (en un rango de 2 a 1000 procesadores), etc.

Basta aclarar que el Modelado Computacional es muy atractivo actualmente tanto para la Química, Física y para la Ciencia de Materiales por su poder predictivo. Siendo, además esta herramienta de gran ayuda actualmente en diversas áreas.

Adicionalmente damos a conocer en forma esquemática el valor de la Simulación Computacional en cuatro puntos, modelos de algunos sistemas que pueden ser obtenidos mediante algunos graficadores, así como algunas propiedades obtenibles.

II Aplicabilidad de la Simulación Computacional

La Química Cuántica Computacional, es la modelización cuantitativa de fenómenos de interés químico usando técnicas computacionales.

Examinando el concepto de:

- Modelización cuantitativa, encontramos que es la creación de modelos capaces de reproducir la realidad de forma precisa. Estos modelos son los que provee la Química teórica.
- Técnicas computacionales, es decir, la implementación eficiente de los modelos y su utilización a través de, y gracias a, la tecnología informática.

Los métodos computacionales (en especial del punto de vista de la Química, Física como de Ciencias de Materiales, así como desde el punto de vista general) se utilizan para resolver problemas reales modelando su comportamiento debido a que:

- Dichos problemas son intratables desde el punto de vista experimental (condiciones que serían peligrosas o no fácilmente alcanzables).
- Simplemente por que los experimentos en computadora son más baratos y controlables (Figura 2).

Niveles de aplicación:

- Química Computacional a nivel usuario (Nivel Básico): Aplicación del software desarrollado dentro del área. Conocimientos de informática mínimos.
- Química Computacional a nivel profesional: Investigación y desarrollo de metodologías y herramientas software en química computacional y/o aplicación a problemas químicos del software del área. Conocimientos de informática amplios: sistemas operativos, ingeniería del software, programación, bases de datos, lenguajes orientados a objetos, etc.

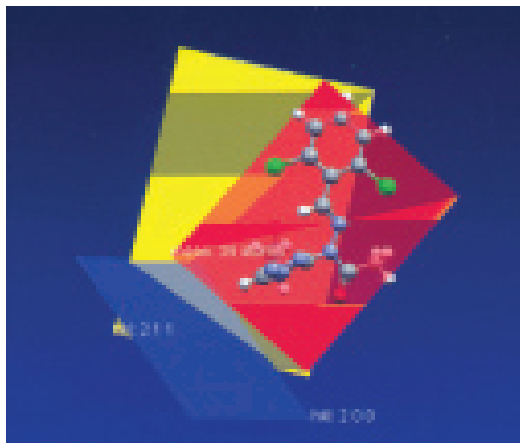


Figura 1. Tipo de simulación que se puede lograr en Química usando el programa Mercury (Mercury 1.1 2002).

Propiedades que se pueden obtener mediante la Simulación Computacional.

De acuerdo a los intereses que se tengan, son las propiedades que pueden ser obtenidas: por ejemplo si lo vemos desde

el punto de vista la de Química, podemos investigar la geometría molecular, como distancia de enlace, ángulos de enlace, ángulos de torsión. ángulos diedros (ángulos entre planos que forman grupos de átomos), etc.

Del lado de la Física y Ciencia de materiales, podemos investigar las propiedades ópticas, magnéticas, elásticas, estructurales (parámetros de celda en sólidos, volumen de la celda, energía del estado base, densidad de estados), etc. Todo esto es posible gracias modelos implementados en códigos computacionales, ejemplo: Cerius2, dicho programa abarca módulos de Química, Física y Ciencias de Materiales, el único inconveniente es el costo de dicho programa, uno más comercial son la serie de programas Gaussian (Frisch y Frisch 1998).

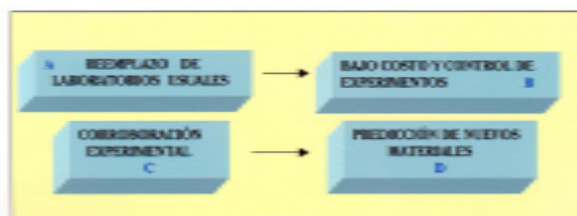


Figura 2. Representación del funcionamiento que realizan los Laboratorios Virtuales.

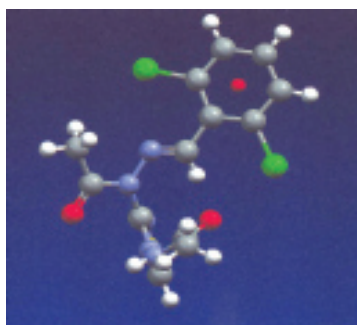


Figura 3. Otro tipo de molécula que puede ser obtenida mediante el programa Mercury.

III Logros Científicos.

Un gran ejemplo del trabajo logrado en recientes años en el área de la Química Cuántica Computacional y Física del Estado Sólido Computacional vio sus frutos realizados en el Matemático inglés John Pople y el Físico australiano Walter Kohn, ganadores del premio Nobel de Química en 1998 (Página web:a) por su contribuciones pioneras al desarrollo de métodos que pueden ser empleados para estudios teóricos de las propiedades de moléculas y los procesos químicos en que están involucradas.

Gracias a la teoría de funcionales de la densidad (Página web:b), de Kohn, y a las matemáticas de Pople, ha sido posible

no sólo simular con modelos muy confiables los procesos químicos y de sólidos de compuestos ya conocidos, sino predecir algunos otros con moléculas que serán artificialmente creadas con posteridad. Uno puede prever cómo se comportarán las moléculas que podrían ser útiles para el desarrollo de medicamentos.

Entender cómo responden los enlaces químicos entre las distintas moléculas de un compuesto determinado ha sido un sueño largamente perseguido por científicos en campos que van de la biología molecular a la industria farmacéutica, pasando por la astroquímica.

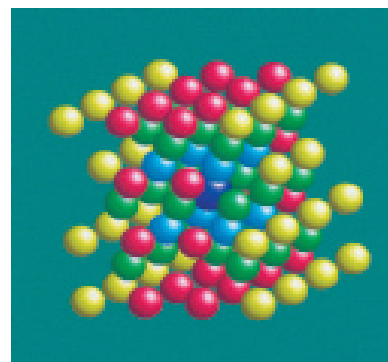


Figura 4. Representación del modelo de cluster de ThO₂ (con estructura BCC, estructura cúbica centrada en el cuerpo), aquí las esferitas representan las cargas puntuales (81, los primeros vecinos en verdes, los segundos vecinos en rojo y los terceros vecinos en amarillo), obtenida con el programa Rasmol (RasWin Molecular Graphics 2000), dicho programa es útil tanto para moléculas como sólidos.

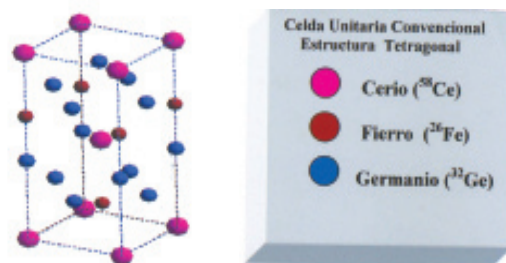


Figura 5. Compuesto CeFeGe₃ obtenida mediante el programa Cerius² (MSI 2000), dicho programa tiene una amplia aplicación en la Química, Física y Ciencia de Materiales.

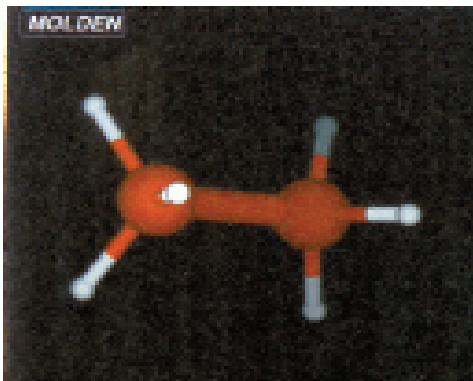


Figura 6. Molécula del etano obtenida mediante el programa Molden Versión 3.7 (2000).

IV Conclusiones.

Si queremos hacer uso del Modelado Computacional en lo que se conoce por Laboratorios Virtuales, tendremos que considerar tanto su estructura matemática como informática para lograr un mejor aprovechamiento de esto que hoy en día se ha vuelto una poderosa herramienta de trabajo y sobretodo de bajo costo y poder de predicción que son de interés tanto Químico como Físico, así como para el diseño de nuevos materiales en comparación con un laboratorio usual (señalamos que la finalidad de estos Laboratorios es reemplazar estos laboratorios usuales) de investigación en sus dos vertientes básico y profesional.

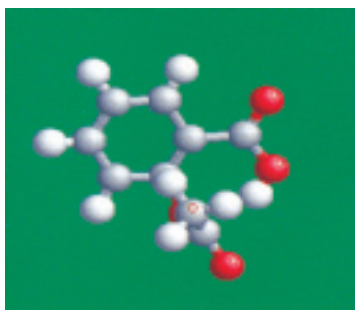


Figura 7. La molécula de la aspirina obtenida con Rasmol (RasWin Molecular Graphics 2000).

Agradecimientos

Se agradece al Centro de Cómputo del Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas" de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla las facilidades otorgadas para la realización de dicho trabajo.

Ernesto Chigo Anota
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Referencias

- Cerius² Versión 4.2 MatSci
2000 Molecular Simulations Inc., www.accelrys.com/cerius2/
- CHIGO ANOTA E.
2002 Rev. Avance Tecnológico y Sociedad, Año 8, Núm 24, Págs. 33-37 Mayo-Agosto.
- CHIGO ANOTA E
2002 En revisión en The Journal Materials Education, Edición en Español.
- CHIGO ANOTA E Y RIVAS SILVA J. F
2002 Rev. Temas de Ciencia y Tecnología, Vol. 6, Núm 18, Págs. 17-20, Sept-Dic.
- FRISCH ÆLEEN Y FRISCH MICHAEL J. GAUSSIAN
1998 User's Reference (Gaussian, Inc.);
- FOESMAN B. JAMES Y FRISCH ÆLEEN
1996 Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Segunda Edición.
<http://www.nobel.se/chemistry/laureates/1998/index.html>.
- 1999 <http://lsdm.dichi.unina.it/dft/DFT.html>.
- MERCURY VERSIÓN 1.1
2002 Consultar: www.ccdc.cam.ac.uk/mercury
- Molden Versión 3.7
2000 Consultar: <http://www.cmbi.kun.nl/~schaft/molden/molden.html>
- RasWin Molecular Graphics, Windows Versión 2.7.2
2000 consultar: <http://www.iucr.ac.uk/iucr-top/cif/software/rasmol>.