



En el ICIQ

Hay tres grupos del ICIQ que trabajan en química computacional (Profs. **Bo**, **López**, **Maseras**). Hacen sus cálculos en un *clúster* de ordenadores del ICIQ y también en los superordenadores del *Barcelona Supercomputing Center* como **MareNostrum**.

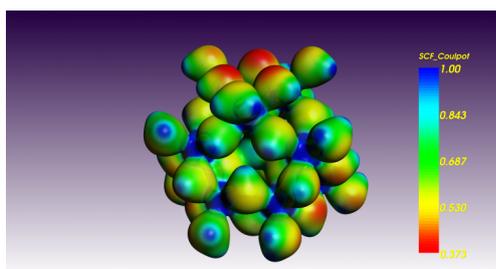
Química computacional

Química computacional

No toda la química se hace en laboratorios llenos de matraces y disoluciones de colores. En la química computacional, se utilizan ordenadores para calcular dónde están y cómo se comportan los electrones de los átomos y las moléculas.

Gracias a la capacidad y velocidad de cálculo de los ordenadores pueden predecirse el comportamiento de las reacciones químicas y las propiedades de los nuevos materiales.

Una de las grandes ventajas de la química computacional es el gran ahorro de tiempo y dinero que supone. Repetir experimentos en el laboratorio supone un enorme gasto de reactivos y disolventes, además de grandes quebraderos de cabeza para dar con las condiciones de reacción idóneas. Preguntarle al ordenador suele ser más sencillo. Introduciendo unas cuantas fórmulas y parámetros, los programas de química computacional pueden predecir qué funciona mejor. Y, generalmente, aciertan.



La química computacional simula las propiedades de la materia utilizando ordenadores.

No sólo sirven para adivinar el futuro. También son muy útiles para explicar qué pasa dentro de los matraces de los químicos experimentales. Muchas veces podemos conocer los reactivos de partida y analizar la composición de los productos pero, ¿cómo se han formado estos últimos a partir de los primeros? Podemos enseñar a los

ordenadores las reglas básicas de la química para que, después, calculen cuáles son los intermedios de reacción más probables. Un ejemplo práctico: podemos enseñarle al ordenador unos huevos, harina, azúcar, aceite y un bizcocho. Él será capaz de explicar que para formar el producto (el bizcocho), hemos batido los huevos, hemos mezclado los otros ingredientes, y hemos horneado la mezcla media hora. La química computacional también desentraña los mecanismos de las reacciones, algo fundamental para comprender cómo se comportan las diferentes sustancias y para poder avanzar en el desarrollo de nuevas metodologías y productos.

Para saber más

Otros recursos

- **El robot que tuitea moléculas. (Voz Pópuli)**
- **Mare Nostrum**