



Química computacional en tu vida

Por Carlos Eduardo Barrera Díaz
y Nelly Ma. de la Paz González Rivas

¿Alguna vez te has puesto a pensar qué tanto influye la química en tu vida? Si observas cuidadosamente verás que esta apasionante ciencia está más cerca de ti de lo que alguna vez pensaste, pues las computadoras ayudan a estudiar procesos relacionados con esta área, como las propiedades de muchos compuestos sin tener que trabajar con ellos en el laboratorio. Por ejemplo, cuando inicias tu día y realizas actividad deportiva, secretas sustancias químicas que producen efectos positivos en el cerebro, tal es el caso de las endorfinas (figura 1), que se crean en las glándulas pituitarias, cuya función es ser neurotransmisores para el bienestar, control y complacencia del organismo.

Además de esto se produce la serotonina, considerada por algunos investigadores como la responsable de mantener en equilibrio nuestro estado de ánimo. Se ha descubierto que una deficiencia de ésta se asocia con la depresión, por eso si un día estás triste, piensa en algo que active esta sustancia en tu cuerpo, como un chocolate.

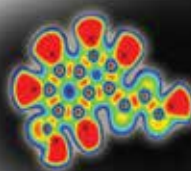


Figura 1. Estructura molecular de la endorfina y función de localización de carga de la serotonina

El cacao contiene teobromina (figura 2), molécula generadora de alegría, este alcaloide pertenece a las metil-xantinas. En el caso del chocolate, los antioxidantes que contiene evitan que las células se deterioren.

Otro ejemplo es cuando desayunas y tomas un vaso de leche. ¿Cuánta química hay en esta actividad? Primero, para garantizar que la leche esté en condiciones salubres, es necesario aplicar procesos fisicoquímicos, como la pasteurización y la homogenización, y después podrás observar la lactosa, disacárido formado por la unión de una molécula de glucosa y otra de galactosa. La lactosa (figura 3) ayuda a la absorción del calcio, permitiendo la correcta formación de los huesos y posee efectos prebióticos que benefician la flora intestinal.

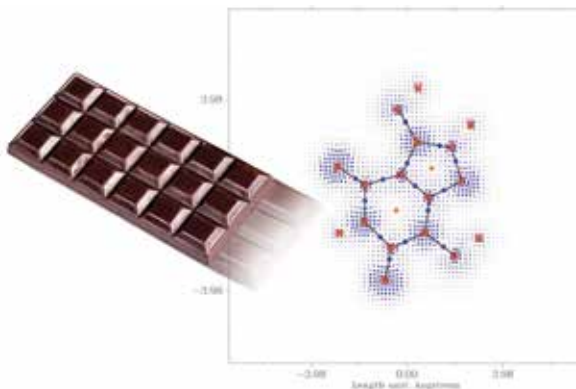


Figura 2. Mapa de densidad de la teobromina

Si prefieres el café, debes saber que nos hace sentir con energía y vitalidad. Desde el punto de vista químico, la cafeína (figura 4) pertenece a las xantinas; funciona como estimulante del sistema nervioso central y tiene un efecto temporal de restauración del nivel de alerta. Quienes consumen café reducen el riesgo de padecer diabetes tipo 2, así como enfermedades neurodegenerativas, y combaten de mejor manera la depresión; dos tazas al día son suficientes para obtener estos beneficios.

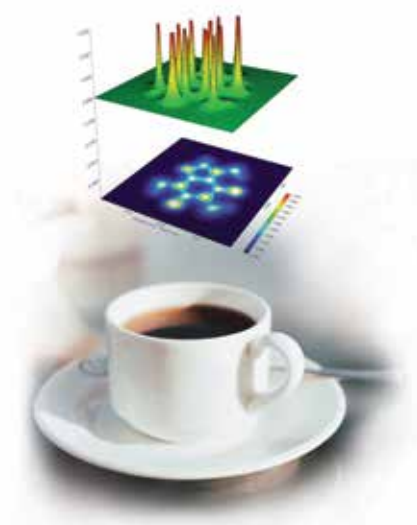


Figura 4. Densidad electrónica de la cafeína¹

Ahora un último ejemplo: ¿cuántas veces al día usas el celular? Las baterías de estos dispositivos son celdas electroquímicas en las cuales ocurren reacciones químicas para obtener energía. Las más avanzadas están hechas de litio, elemento alcalino de gran utilidad por su capacidad térmica. También se emplean en los automóviles híbridos. En el 2015 el consumo de litio representaba 15 000 toneladas y se calcula que se incrementará a 136 000 en el 2025. Por lo tanto, dejaremos de emitir grandes cantidades de gases de efecto invernadero, causantes del cambio climático. ☞



Figura 3. Potencial electrostático proyectado sobre la densidad electrónica de la lactosa

¹ Todas las imágenes fueron obtenidas mediante un programa especializado en química computacional.

Referencias

- Iquimicas.com (2018). "La química del chocolate". <<https://iquimicas.com/la-quimica-del-chocolate/>>.
- Parr, Robert y Weitao Yang (1989). *Density functional theory of atoms and molecules*, Nueva York: Oxford University Press. <https://books.google.com.mx/books?id=mGOp5c5iwU4C&printsec=frontcover&redir_esc=y#v=onepage&q&f=false>.
- Psicología y mente (2018). "Serotonina: 6 efectos de esta hormona en tu cuerpo y mente". <<https://psicologiymente.net/neurociencias/serotonina-hormona>>.
- Valiev, Marat *et al.* (2010). "NWChem: a comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations" en *Computer Physics Communications*. <<https://pdfs.semanticscholar.org/99a1520bc334c111ff84619a1ac376f009d0d3bf.pdf>>.



Carlos Eduardo Barrera Díaz es doctor en Ingeniería Ambiental por la UAM, miembro del SNI desde el 2004 y ganador del Premio Estatal de Ciencia y Tecnología en el 2014. Fue director de la Facultad de Química de la UAEM y actualmente es secretario de Investigación y Estudios Avanzados de la misma institución.



Nelly Ma. de la Paz González Rivas es profesora-investigadora adscrita al Centro Conjunto en Química Sustentable UAEM-UNAM. Sus líneas de investigación son modelado y dinámica molecular, diseño racional de fármacos y análisis de reactividad química mediante DFT.