

La Química, Ciencia Experimental y Teórica

Nancy Martín

Irais Vera

Universidad Autónoma Metropolitana

Unidad Iztapalapa

Departamento de Química

Resumen

En este trabajo se presenta un balance sobre el enfoque de la química teórica y experimental en la carrera de la Licenciatura en Química de la UAM-I y en la química, de forma general. Se presenta una revisión del plan de estudios de la carrera en cuanto a la inclusión de laboratorios y una reflexión sobre lo que representa los aspectos teóricos y experimentales en la Química.

Palabras clave

Química teórica, Química Experimental, Química UAM-I.

Abstract

In this paper, a balance is present the theoretical and experimental chemistry approach in the UAM-I Bachelor's Degree in chemistry and in chemistry in general. A revision of the study plan of the career regarding of the inclusion of laboratories and a reflection, on what represents the theoretical and the experimental aspects in Chemistry is presented.

Keywords

Theoretical Chemistry, Experimental Chemistry, Chemistry UAM-I.

Introducción

La Ciencia, en general, y la Química, en particular, han hecho posible una mejora apreciable de nuestra calidad y esperanza de vida. Sin embargo, dentro de muchos descubrimientos científicos algunos han sido y son utilizados para fines menos generosos.

En la historia de la ciencia la mayoría de sus exponentes consideran al siglo XVII como el punto de partida de lo que hoy conocemos como actividad experimental.

Existe interdependencia entre lo teórico y lo experimental. Al igual que la teoría, el trabajo experimental es parte de la ciencia y no una herramienta de ésta. No se establece una jerarquía entre ellos, ambos tienen la misma relevancia en la producción de conocimientos. La experiencia está orientada por las teorías, creencias y significados, los cuales a su vez son justificados por la experiencia; así, en un experimento se considera aquello que resulta relevante a la luz de una teoría y de las condiciones particulares del problema a resolver; no obstante, ante la presencia de datos fuera de lo común que plantean problemas empíricos, es necesaria la construcción de modelos que los representen. En ciencia, el uso de modelos es esencial para entender y explicar los fenómenos naturales (Andrés Z y col. 2006, Manzur A. y col. 2016).

En relación con lo anterior, se propone hacer un balance crítico sobre el enfoque teórico y experimental de la Química, tanto dentro de la carrera de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa (UAM-I), como de forma general.

Química en la UAM-I

El inicio de la carrera de la Licenciatura en Química de la UAM-I data de 1974, está incorporada a la División de Ciencias Básicas e Ingeniería (CBI) y es responsabilidad principalmente del Departamento de Química, el cual se conformó como departamento independiente en 1977.

En la UAM-I el sistema de estudios es trimestral, con un total de 3 trimestres por año, que consta de 12 semanas cada uno.

La carrera de Química, en particular, es de 12 trimestres, más un trimestre adicional de cursos complementarios (en caso de ser necesario), antes de iniciar el tronco general de estudios.

Una de las misiones de la carrera es mantener el reconocido prestigio académico, científico y cultural del programa de la Licenciatura en Química a nivel nacional y mantener su acreditación; la última, se obtuvo en noviembre del 2017, con vigencia de cinco años, por el Consejo Nacional de la Enseñanza y del Ejercicio profesional de las Ciencias Químicas, A.C. (CONAECQ), que es una Asociación Civil que cuenta con la autorización del Consejo para la Acreditación de la Educación Superior, A. C. (COPAES), única instancia validada por el Gobierno Federal a través de la Secretaría de Educación Pública (SEP).

Esta última evaluación del programa permitió reflexionar sobre las debilidades y fortalezas del programa. Una de las fortalezas es la alta formación académica de la planta docente, los cuales en su mayoría son profesores titulares con estudios de posgrado, pertenecen al Sistema Nacional de Investigadores (SNI) y cumplen con el perfil del Programa para el Desarrollo Profesional Docente (PRODEP).

Según la CONAECQ, el plan de estudios debe revisarse con cierta frecuencia. En este sentido, las últimas actualizaciones realizadas fueron, una en el 2012 donde se modificó el plan de estudios de la Licenciatura, que dio inicio en el 2013-I (Tabla 1) y otra, en 2017, donde se realizó una adecuación (solo hubo cambios en seriación de materias).

En el plan de la Licenciatura de 2013

se incluyen aspectos teórico-prácticos en una proporción equilibrada de acuerdo con la naturaleza del programa. Según lo anterior, se cumple con el mínimo de horas de laboratorio requeridas por la CONAECQ (>800 h) (Tabla 2). Además, cabe mencionar que nuestra Licenciatura en Química está enfocada hacia la formación en fisicoquímica.

Por otra parte, en la carrera de Químico, de forma general, el trabajo experimental es un elemento fundamental y característico de la actividad científica, por lo que resulta imperativo que los alumnos lo conozcan y lo sepan desarrollar adecuadamente. En consecuencia, la enseñanza del laboratorio en la carrera de Química aparece bien estructurada dentro del plan de estudios.

El Departamento de Química de nuestra Institución cuenta con una adecuada infraestructura de laboratorios a nivel departamental (Tabla 3), en las ocho áreas de investigación que lo integran: Biofisicoquímica (BFQ), Catálisis (CAT), Electroquímica (EQ), Fisicoquímica de Superficies (FQS), Fisicoquímica Teórica (FQT), Química Analítica (QA), Química Cuántica (QC) y Química Inorgánica (QI) (Figura 1); además, se tienen laboratorios divisionales con grandes equipos especializados de análisis que dependen de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería (Tabla 3), donde los alumnos de los últimos trimestres pueden hacer uso de ellos. Por último, están los laboratorios de docencia, que son propios del programa. Estos cuentan con equipos menores donde se llevan a cabo la gran mayoría de prácticas de laboratorio del plan.

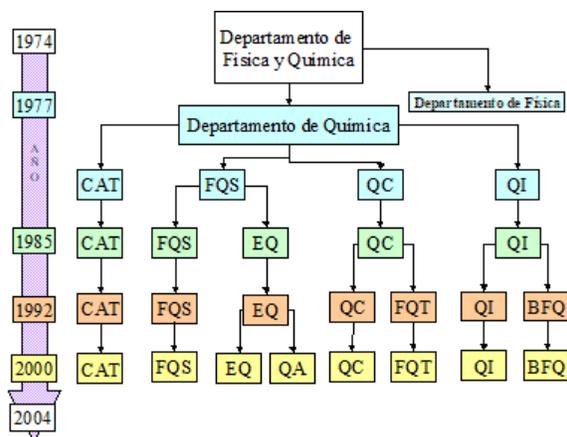


Figura 1. Áreas de Investigación del Departamento de Química. CAT: Catálisis; BFQ: Biofísicoquímica; EQ: Electroquímica; FQS: Físicoquímica de Superficies; FQT: Físicoquímica Teórica; QA: Química Analítica; QC: Química Cuántica; QI: Química Inorgánica [Martin y col., 2015].

Los laboratorios de docencia e investigación cumplen con las medidas de seguridad requeridas entre las cuales están la disponibilidad de extintores en número y características adecuadas para su uso y con fecha de caducidad vigentes, sistemas de eliminación de residuos, sistemas de alarma de humo, salidas de emergencia despejadas y claramente señaladas, regaderas, reactivos neutralizantes; así como también se cuenta con los reglamentos de seguridad de la Institución (UAM-I, 2009).

Los alumnos son informados sobre las medidas de seguridad en el laboratorio y su aplicación sobre el manejo de equipos, instrumentos, materiales y reactivos, así como el empleo de las técnicas para el desecho de sustancias químicas que se obtienen como productos en las prácticas y que no pueden utilizarse como reactivos posteriormente. La institución cuenta con un almacén de desechos de sustancias químicas. El programa exige de un mínimo

de infraestructura en los laboratorios para el uso de los alumnos y con el equipamiento mínimo necesario, los cuales se han cumplido hasta la fecha.

En cuanto a la asignación presupuestal a la docencia por parte de la División de CBI, fue muy favorable durante varios años puesto que se tenían los apoyos del Fondo para la Modernización de Educación Superior (FOMES) y del Programa Integral de Fortalecimiento Institucional (PIFI). Sin embargo, después de 2006 estos apoyos no fueron renovados, reduciéndose así el apoyo económico (Medina V., 2009). Sin embargo, en los últimos años se ha intentado subsanar esta situación con convocatorias a Programas Divisionales para el Mejoramiento de los Laboratorios de docencia de la DCBI. Si bien han permitido renovar equipo y material de laboratorio obsoleto o inservible, no es suficiente para satisfacer las necesidades de una ciencia en constante desarrollo.

No obstante de la buena infraestructura con la que cuenta actualmente la Institución, en las últimas décadas, la realidad que enfrentan las Instituciones de Educación Superior (IES) Nacionales suele ser bien distinta. Por una parte, los presupuestos que el gobierno ha otorgado en los últimos años a la IES públicas se han mantenido sin cambios, sin considerar que la paridad del dólar ha ido en aumento, así como la inflación.

Así, se tiene que en las carreras experimentales, además de los costos financieros que implican equipos y reactivos necesarios para las actividades de laboratorio, se debe adicionar el presupuesto relacionado con mantenimiento de equipos, instalaciones eléctricas, gases, vacío, agua, etc. Y, considerando que la UAM-I tiene 45 años de

Tabla 1. Plan de estudios de la Licenciatura en Química (Plan 2013-I). En negritas están las UEA de o con laboratorio.

0	
CURSOS COMPLEMENTARIOS	
I	II
MECÁNICA ELEMENTAL I QUÍMICA CÁLCULO DIFERENCIAL	MECÁNICA ELEMENTAL II ESTRUCTURA DE LA MATERIA CÁLCULO INTEGRAL MÉTODO EXPERIMENTAL II
III	IV
ELECTRICIDAD Y MAGN. ELEMENTAL I TRANSFORMACIONES QUÍMICAS CÁLCULO DE VARIAS VARIABLES ÁLGEBRA LINEAL APLICADA I	LAB. QUÍMICA I FISICOQUÍMICA I EC. DIFERENCIALES ORDINARIAS I QUÍMICA ORGÁNICA I QUÍMICA ANALÍTICA I INGLES INTERMEDIO I
V	VI
LAB. QUÍMICA II FISICOQUÍMICA II PROG. APLICADA A LA QUÍMICA QUÍMICA ORGÁNICA II QUÍMICA ANALÍTICA II INGLES INTERMEDIO II	LAB. FISICOQUÍMICA FISICOQUÍMICA III LAB. QUÍMICA ORGÁNICA QUÍMICA ORGÁNICA III QUÍMICA INORGÁNICA I INGLES INTERMEDIO III
VII	VIII
LAB. QUÍMICA ANALÍTICA FISICOQUÍMICA IV QUIM. ANALÍTICA III QUÍMICA INORGÁNICA II OPTATIVA	LAB. ANALISIS INSTRUMENTAL FISICOQUÍMICA V LAB. QUÍMICA INORGÁNICA QUÍMICA INORGÁNICA III OPTATIVA
IX	X
BIOQUÍM. Y BIOL. MOL. I FISICOQUÍMICA VI OPTATIVA OPTATIVA	BIOQUÍM. Y BIOL. MOL. II LAB. FQ COMPUTACIONAL LAB. BIOQUÍMICA OPTATIVA
XI	XII
PROYECTO TERMINAL I OPTATIVA OPTATIVA SERVICIO SOCIAL	PROYECTO TERMINAL II OPTATIVA OPTATIVA SERVICIO SOCIAL

Tabla 2. No. total de horas* del plan de estudios de la Licenciatura en Química (Plan 2013-I)

No. total de horas de Teoría	1012
No. total de horas de Laboratorio	1166
No. total de horas de Talleres	1008
No. total de horas en Proyecto Terminal	720
No. total de horas (Otros u Optativas)	214

*No. Total de horas consideradas como el No. total de horas de clases a la semana, multiplicadas por el No. de semanas que tiene el trimestre

Tabla 3. Equipos de análisis en química en la UAM-I.

Divisional (CBI)	Departamental (Química)	Docencia (Química)
Resonancia Magnética Nuclear (RMN) para análisis de sólidos y líquidos	Cromatógrafos de Gases	Polarímetro
Microscopios Electrónicos, de Barrido (SEM), de Transmisión (TEM) y de Fuerza Atómica (AFM)	Cromatógrafos de Líquidos (HPLC)	Colorímetros
Difractómetro de Rayos X (DRX) y de Dispersión a Ángulos Pequeños (SAXS)	Centrifugadora de alta velocidad	Calorímetros
Espectrometría de Masas (MS)	Sistemas de Temperatura Programada (TPD, TPR, DSC, DTA)	pH-metros
Supercomputadora Central con 3800 Procesadores y varios GPU (Graphics Processing Unit)	Espectrómetro Infrarrojo	Conductímetros
Cúmulos de Estaciones de Trabajo para cómputo	Espectrómetro UV-Visible	Espectrómetro de Luminiscencia
Espectrómetro Raman	Espectrómetro de Fluorescencia	Analizador elemental CHN/O
	Espectrómetro de Dicroísmo Circular	Potenciostato
	Fisorción	Analizador termogravimétrico (TG/DTA)
	Voltametría cíclica	Espectrómetro de Absorción Atómica (AA)
		Desionizador de agua
		Refractómetro
		Equipo de Electroforesis
		Celdas electroquímica
		Voltametría cíclica
		Microcentrifugadoras
		Espectrómetro UV-Vis
		Espectrómetro Infrarrojo

antigüedad, estos gastos extras se dan cada vez con mayor frecuencia.

Lo anterior, ha hecho que hoy en día en las carreras llamadas experimentales (o de laboratorio húmedo), se enfrenten problemas como son que la mayoría de los equipos y reactivos que se usan en los laboratorios son de exportación, los cuales están afectados por los altibajos del dólar por un lado, y por las restricciones de aduana por el otro. También, el hecho que los equipos con que se cuentan son de una antigüedad mayor a 10 años, los requerimientos de mantenimiento son una constante; además, los problemas con las líneas eléctricas, el desagüe, etc.; todo en conjunto comienza a ser un inconveniente, puesto que la Universidad no cuenta con un contrato institucional de servicio preventivo, lo cual trae como consecuencia que el presupuesto sea para servicio de reparación o correctivo, lo cual difícilmente puede planearse con anticipación, y en algunos casos, no se cuenta con el dinero en el momento en que se requiere y que siempre, resulta mucho más costoso.

Por tanto, en los últimos años en la UAM-I, con mayor frecuencia es necesario revisar las prácticas de laboratorio que se tienen ya que por falta de reactivos o de equipos, se deben cambiar o cancelar. Sin embargo, esto es una ventana de oportunidad ya que permite plantear nuevas prácticas e incluso sugerir la compra de nuevos equipos que puedan cumplir con las expectativas de una ciencia en constante desarrollo, como lo es la Química.

De igual forma, una forma de reducir los costos, el tiempo y el esfuerzo que representa una UEA de laboratorio en la Licenciatura, es posible a futuro realizar

en la Institución videos de laboratorios introductorios, que ayuden en el aprendizaje de técnicas, manipulación de material, o manejo de equipos (Moozeh K. y col., 2019).

Para la realización del Proyecto de Investigación Terminal o Servicio Social de los alumnos de la Licenciatura, se cuenta con 8 áreas de investigación del Departamento de Química (Figura 1) (Martin y col., 2015). Dentro de estas áreas, 5 de las ocho áreas tienen líneas de investigación experimentales; sin embargo, existen diversos grupos de investigación dentro de las mismas que han ido creciendo y realizan investigación de química a través de la computadora. Así que actualmente, los estudiantes pueden seleccionar su Proyecto Terminal, a través de dos opciones, experimental o teórico. Lo ideal, es seguir un proyecto donde se realice investigación de las dos partes. Sin embargo, en un proyecto a seis meses a nivel licenciatura surge la pregunta ¿Son los costos (financiero o de tiempo) de un proyecto, experimental o teórico, equivalentes? Veamos a continuación si es así.

En cuanto a lo financiero, tomemos como ejemplo un experimento de una reacción de hidrogenación catalítica de benceno, la cual es catalizada por metales (Au, Pd, Pt). Si se considera que el laboratorio cuenta con el equipo, esto es, un sistema catalítico para reacción en fase gaseosa acoplado a un cromatógrafo de gases con computadora para el análisis de los compuestos como el de la Figura 2, con un costo aproximado de \$42,000 USD; entonces, sólo se tienen que contabilizar los costos de los reactivos a usar (Tabla 4), esto es, un total de \$1,293 USD. En cuanto a tiempo, para la realización de un proyecto corto, se tendrían tres etapas a seguir:

síntesis de los catalizadores, caracterización de las muestras y evaluación catalítica. Para esto, si se preparan dos catalizadores, por ejemplo, para ver el efecto del metal, se tendría una cronología de seis meses justos, si no hay fallas de energía eléctrica o en el equipo. En algunos casos, la obtención de seis puntos para una curva, por ejemplo, para el cálculo de una energía de activación, puede llevarse hasta tres semanas. Esto es, que la obtención de resultados concluyentes puede tardarse hasta 6 meses.



Figura 2. Sistema catalítico de hidrogenación.

Ahora, si el proyecto se orienta a un estudio teórico, como llevar a cabo la simulación de la cinética de esta reacción por ejemplo, el equipo necesario para ello sería una computadora y un software, los cuales, en general, los tiene la Institución; pero, en su caso, tendrían un costo aproximado de \$2,614 USD. En cuanto a tiempo, es posible conseguir buenos resultados en un período de tres meses. Aquí hay que destacar que el tiempo de cómputo científico, en caso de ser necesario, también tiene un costo (costo hora: 50 centavos por hora de GPU); si consideramos que en un proyecto se emplean 20 GPUs por 330 horas (Proyecto Terminal I y II) el costo sería de \$3,300 MN. Sin embargo, muchas de las tareas que se ejecutan en un proyecto necesitan alrededor de 80 GPUs, lo que

puede elevar el costo hasta \$13,200 M.N.

Tabla 4. Costos de reactivos químicos en dólares (Cotización 2019)

Descripción	Unidad	Precio/USD
Óxido de Aluminio	100 G	66.5
Acetilacetato de Platino	1 G	706.1
Benceno	1 L	126.0
Hexano	1 L	97.7
Hidrógeno	6 m3	118.0
IVA 16 %		178.3
TOTAL:		1292.6

En resumen, los costos financieros y de tiempo, pueden hacer que la balanza se incline hacia los estudios teóricos, ya que aún cuando los costos sean equivalentes, en corto tiempo se pueden obtener resultados valiosos con posibilidad de publicarse. No obstante, es posible hacer una selección de experimentación sencilla que resulte menos costosa. Claro hay que aclarar que no siempre los costos son el factor decisivo.

En el caso de los laboratorios de docencia, las prácticas que se realizan son diversas y cada laboratorio presenta costos diferentes en cuanto a consumibles, ya que el equipo se usa de manera simultánea. Un ejemplo es el caso del laboratorio de bioquímica de docencia, si consideramos un grupo formado por 6 equipos, el costo por año (considerando 3 trimestres) asciende a alrededor de \$1829 USD (Tabla 5). Si bien es importante destacar que la preparación de los alumnos se puede complementar con cómputo científico y simuladores, la práctica experimental es fundamental en su formación académica.

Tabla 5. Costo de los consumibles empleados en el laboratorio de bioquímica. Debe notarse que las presentaciones de los reactivos no coinciden con las presentaciones comerciales, se ajustó a lo aquí señalado.

Descripción	Unidad	Precio/USD
Agarosa	1 (50 g)	152
Marcador de DNA	1 (50 μ g)	65
Revelador de DNA	1 (250 μ L)	201
Sales para amortiguadores	varias	100
Medios de cultivo	1 (250 g)	628
Enzimas de restricción		.
Eco RI	1(5000units)	46
Nde I	1(500 units)	40
Material para PCR	1 (100 units)	140
Material para columna hidrofóbica		130
Otros (puntas, tubos, etc.)		75
IVA 16 %		252
TOTAL:		1829

En cuanto a otros factores determinantes, es necesario tener una visión más clara y de forma general acerca de la química experimental y teórica. Por tanto, a continuación, se resume brevemente las características de lo que han sido ambas a través del tiempo.

La Química ¿Ciencia Experimental o Teórica?

Esto por supuesto no es nuevo, pues desde hace siglos a la fecha, se ha hecho mucho y se sigue trabajando con muchos cálculos matemáticos en la llamada química teórica. Estos brindan a experimentadores y teóricos la visión práctica de un fenómeno, sugiriendo a veces nuevas correlaciones dentro y fuera del campo, y típicamente brindan cohesión y una calidad genérica a muchas observaciones experimentales (Marcus, 2010). El nombre de numerosas ecuaciones aparece desde siempre en la investigación en química teórica tales como, Lennard-Jones, Pauling, Eyring, Debye-Hückel,

Gibbs, Boltzmann, Maxwell, Arrhenius, Hammett, entre otros. Estas ecuaciones han sido de mucha utilidad para que experimentalistas y teóricos puedan explicar de forma coherente el fenómeno en cuestión.

Uno de los paradigmas centrales de la Química es la relación que existe entre la estructura molecular (la disposición espacial de los átomos en las moléculas) y la función de las moléculas. Por esta razón, los químicos dedican grandes esfuerzos en tratar de conocer la estructura de las moléculas para intentar racionalizar el comportamiento químico y físico de los compuestos. La razón última por la cual los átomos de una molécula adoptan una cierta disposición en el espacio se debe a las interacciones existentes a nivel microscópico. Estas interacciones tienen origen en la estructura electrónica de las moléculas a la cual tenemos acceso tanto experimental como teóricamente. La herramienta experimental para escudriñar la estructura electrónica de la materia

es la espectroscopia, particularmente la ultravioleta-visible (UV-Vis), la de rayos X y, más recientemente, las espectroscopias de femto- (10^{-15}) y atto-segundos (10^{-18}); es pertinente destacar que recientemente la Universidad ha adquirido un equipo láser que funciona en el régimen de femto y eventualmente podría operar también en el atto, así como realizar experimentos de una sola molécula (*single molecule spectroscopy*).

Desde el punto de vista teórico, la herramienta para estudiar la estructura electrónica molecular es la Mecánica Cuántica, que es la rama de la Física que nos permite explorar el comportamiento del mundo microscópico en escalas inaccesibles a los sentidos humanos, entre ellas, la escala electrónica (Marcus, 2010).

La revolución en la química teórica desde entonces se debe en gran parte a la introducción de los cálculos electrónicos computacionales. Ha habido muchas innovaciones y desarrollos en diversas aplicaciones, que van desde el estudio de reacciones químicas simples hasta reacciones en sistemas biológicos complejos, con sus canales iónicos, cambios conformacionales, transferencia de protones, y plegamiento o despliegue de proteínas. Los cálculos se basan en la ecuación de Schrödinger, la teoría de Newton o las ecuaciones de mecánica estadística, principalmente. En particular, la Mecánica Cuántica quedó bien establecida entre los años 1925 y 1926, después de que se demostró que sus distintas formulaciones (la matricial de Heisenberg, la ondulatoria de Schrödinger y la algebraica de Dirac) están relacionadas. En las décadas de los 50 y 60 del siglo pasado se empezaron a desarrollar métodos y programas para calcular la estructura

electrónica que se denominaron, con toda intención, métodos *ab initio*, que en latín literalmente significa desde *el principio o qué*, o como lo entiende la comunidad de la Química Teórica y Computacional, *de principios*. Luego, rápidamente se empezaron a desarrollar programas para calcular la estructura electrónica de sólidos y superficies. Los resultados en el campo de la interacción de átomos y moléculas con superficies fueron particularmente exitosos; de manera que, para finales de los años 70, no quedaba la menor duda que el camino para estudiar este tipo de problemas era por medio de la Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT). Sin embargo, el impacto de la DFT en la Química, tuvo que esperar hasta finales de los 80. Se puede decir que en los últimos 40 años, los desarrollos teóricos y computacionales nos permiten estudiar la estructura electrónica y molecular de manera *ab initio* en moléculas ¡30 veces! más grandes que las que se podían estudiar a principios de la década de los 70 (Vela, 2016).

Por lo tanto, no es posible hablar de la química experimental sin que esté presente la química teórica o computacional. De hecho la tendencia del estudio de la Química deberá migrar en pocos años a la realización simultánea de experimentos y cálculos teóricos, en donde ambas se complementen y aporten conocimiento (reproducibile y predecible).

Un ejemplo, que hablamos anteriormente, es la catálisis (heterogénea, homogénea, y la biocatálisis), la cual es un área interdisciplinaria y un pilar actual de la ciencia en cuanto a seguridad energética, ambiental y económica (Gogate, 2017) (Tabla 6).

En la catálisis, la síntesis y las interrela-

Tabla 6. Tendencias en los procesos en catálisis homogénea y heterogénea (Gogate, 2017).

Química tradicional	Catálisis Tradicional	Catálisis Novedosa	Biocatálisis Renovable
Materia Prima Industrial	Petróleo	C1-C4	
Ácidos fuertes: solventes orgánicos	Catálisis Inorgánica	Gas Natural	Productos con Ag Estereoselectivos
Rc. No selectivas	Productos Racémicos	Material con sitios específicos	Limpios c/ambiente
Toxicidad por productos	Sub productos	Quirales y Estereoselectivos	Bio-ingeniería
Energía	Energía	Mínimo de subproductos	Bio-compatibles
		Diseño racional	Enzimas

ciones entre un solo sitio y catalizadores monocristalinos o de un solo clúster es un tema interesante de avance con respecto al arte y la ciencia de la catálisis heterogénea (Thomas y Thomas, 2014; Rioux, 2005; Idriss y Barateau, 2000). Las imágenes de super-resolución de una sola molécula, del sitio catalítico y su naturaleza, y el mecanismo de rotación en la superficie es un área interesante, pero muy incipiente, y apenas estamos comenzando a entender bien a la superficie. El futuro está claramente en la caracterización avanzada de catalizadores de trabajo *in situ*, bajo condiciones prácticas de reacción, ya que es la única forma de inferir y dilucidar. Los mecanismos y motores de la actividad y la selectividad química de transformaciones químicas, con el fin de poder desarrollar mejores catalizadores (Gogate, 2017) también lo es. Es imposible llevar a cabo este tipo de investigación solo de forma experimental, es necesario echar mano de los modelos teóricos, tanto de sitios, como de espectros posibles, o sea, un trabajo colaborativo. Esto es solo un ejemplo, puesto que existen múltiples casos de química para trabajar de forma conjunta.

En el Departamento de Química en las áreas de FQS, FQT y QC, se tienen

varias líneas de investigación que trabajan con cálculos teóricos con aplicaciones diversas. También en las áreas de BFQ, CAT y QA, se realizan trabajos de colaboración experimental-teórica. Para realizar estos trabajos de investigación relacionados con la simulación molecular y la química computacional, el Laboratorio de Supercómputo y Visualización en paralelo de la DCBI de la UAM-I cuenta con varios cúmulos de estaciones de trabajo y una supercomputadora central que tiene el orden de 3800 procesadores y varios GPU (*Graphics Processing Unit*), esto dentro del Proyecto Delta Metropolitano de Cómputo de Alto Rendimiento, en el que participan además la UNAM y el CINVESTAV. Hasta la fecha, la UAM-I también cuenta con buena infraestructura para experimentación de punta y la realización de trabajo teórico de calidad.

No obstante, existe la alternativa de combinar técnicas experimentales y teóricas para explorar la estructura de complejos de metales de transición y correlacionarla con su reactividad. Con el uso de métodos de espectroscopía y de estructura electrónica es posible examinar experimentalmente estructuras electrónicas y geométricas de

los sitios activos de metales de transición en enzimas y catalizadores, y analizar las interacciones de estas estructuras para combinarlas con su reactividad.

Esto es, que los cálculos teóricos permiten una aceptable predicción de las propiedades relevantes que necesite conocer cualquier científico y relacionarlas con la estructura electrónica de los materiales.

Conclusiones

En la época actual la experimentación en el laboratorio en países como México resulta cada vez más costosa, por tanto es necesario buscar alternativas complementarias para seguir con la investigación experimental.

En este sentido, es importante crear y avanzar en las metodologías computacionales para modelar interacciones y reactividades moleculares, desde moléculas simples hasta complejos conjuntos moleculares y de los estados de no-equilibrio. Estas metodologías permiten abordar comportamientos moleculares complejos que algunas veces no pueden ser abordados por las técnicas experimentales además que, permiten informar sobre tendencias experimentales a seguir, así como identificar de nuevas reactividades, o direcciones en reacciones químicas, antes de ser implementados, reduciendo costos.

Sin embargo, para que un trabajo de investigación sea completo, el trabajo experimental debe estar acoplado con modelos teóricos y esto se logra trabajando en colaboración con diferentes grupos.

En el plan de estudios vigente de la Licenciatura en Química de la UAM-I existe un buen balance entre los cursos

teórico y experimental y los alumnos terminan con una mayor orientación hacia la Fisicoquímica.

Referencias

- Andrés Z., M. M., Pesa M. A., Meneses J. (2006). La actividad experimental en Física: Visión de estudiantes universitarios, *Paradigma* [on line], 27 (1), 349-363. Maracay, Venezuela.
- Gogate M. R. (2017). New paradigms and future critical directions in heterogeneous catalysis and multifunctional reactors. *Chem. Eng. Comm.*, 204 (1), 1-27.
- Idriss H. y Barteau M.A. (2000). Active sites on oxides: from single crystals to catalysts. *Adv. In Catal.*, 45, 261-331.
- Marcus R. A. (2010). Interaction of theory and experiment: examples from single molecule studies of nanoparticles. *Phil. Trans. R. Soc. A*, 368, 1109-1124.
- Martín-Guaregua N.C., Rojas H.A., Alexandre R.J.R. (2015). Situación actual del Departamento de Química. *Contactos*, 95, 6-12.
- Manzur A., Cardoso J., Vargas R., Estrada A., Ayala D. (2016). *Método Experimental para universitarios*. Colección CBI, UAM-I. México.
- Medina B. V. (2009). *Mirando al futuro. 35 Aniversario. Evolución y Desarrollo de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería*. DCBI, UAM-I, México.
- Moozeh K., Farmer J., Tihanyi D., Nadar T. y Evans G.J. (2019). A prelaboratory framework toward integrating theory and

utility value with laboratories: student perceptions on learning and motivation. *J. of Chemical Education*, 96, 1548-1557.

Rioux R. Ed. (2005). *Model systems in catalysis: single crystals to supported enzyme mimics*. ISBN: 978-0-387-98041-6. Springer-Verlag, New York, N.Y.

Thomas J.M. y Thomas W.J. (2014). *Principle and practice of heterogeneous catalysis*, John Wiley and Sons. Hobken, N.J. EUA.

UAM-I (2009). Instructivo del funcionamiento interno de los servicios de laboratorios de docencia.
http://www.izt.uam.mx/conacad/doc_relevantes/index.htm. (Consulta octubre 2019).

Vela A. (2016). Logros y perspectivas de la Química Teórica. *Educación Química*, 27, 278-285.
[dx.doi.org/10.1016/j.eq.2016.09.001](https://doi.org/10.1016/j.eq.2016.09.001)

OkDiario (2019).
<https://okdiario.com/curiosidades/teoria-cuantica-que-1122049> (Consultada Octubre 2019).