

# Buscando la Aguja en el Pajar: Mínimos Globales con Estructuras Exóticas

*William Tiznado Vásquez*

*Departamento de Ciencias Químicas, facultad de ciencias exactas, Universidad Andres Bello*

*wtiznado@unab.cl*

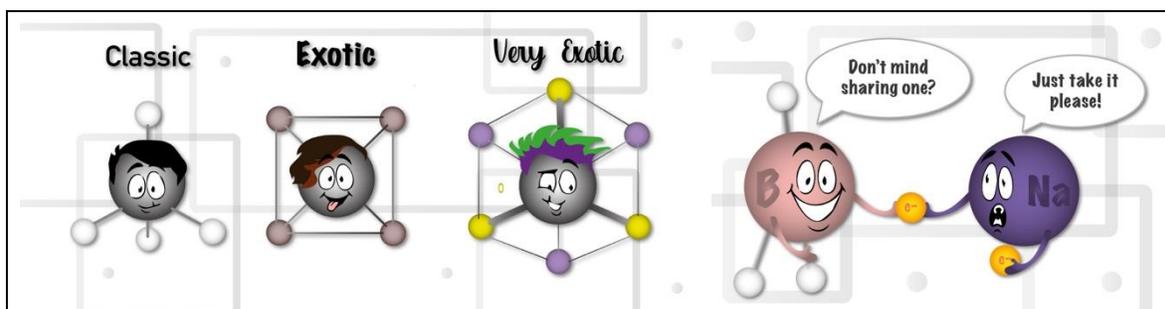
Los químicos por tradición buscan establecer reglas sencillas, para explicar y predecir las formas y propiedades de los sistemas moleculares. Un concepto muy útil en este sentido es el del enlace químico, que interpretado con modelos sencillos como el de Lewis y el principio de repulsión de pares de electrones de valencia, dan cuenta de muchas de las geometrías de diversas moléculas que llenan los textos de química (especialmente química general).

Sin embargo, a medida que se han desarrollado los métodos de síntesis así como de caracterización de nuevos compuestos, se ha puesto en evidencia la limitación de muchos de estos modelos, motivando sus extensiones (como el de estructuras resonantes y violación del octeto para el modelo de Lewis) o excepciones.

Hoy en día, la química computacional brinda herramientas valiosas en el diseño y en la racionalización de nuevos compuestos, que van desde entidades muy pequeñas (como clústeres atómicos de unos cuantos átomos) hasta nuevos materiales. Sin embargo, predecir, identificar a priori las estructuras preferentes y viables de síntesis para una combinación nueva de átomos es un problema complejo.

Es por ello que hemos utilizado la analogía de “buscando una aguja en el pajar” tarea que podría llevar mucho tiempo y esfuerzo, sin seguridad de éxito, si se aborda sin estrategias y recursos adecuados. En nuestro caso, las estrategias adecuadas consisten en utilizar algoritmos que ayuden en la identificación de las mejores estructuras candidatas. En esta charla se mostrará el desempeño de un método evolutivo (algoritmos genéticos), un método estocástico (algoritmo Kick) y métodos guiados (uso de estructuras conocidas, como plantillas iniciales).

Se discutirán aplicaciones en la exploración de diversos sistemas moleculares [1–4].



## Referencias

1. Yañez, O.; Báez-Grez, R.; Inostroza, D.; Rabanal-León, W.A.; Pino-Rios, R.; Garza, J.; Tiznado, W. AUTOMATON: A Program That Combines a Probabilistic Cellular Automata and a Genetic Algorithm for Global Minimum Search of Clusters and Molecules. *J Chem Theory Comput* **2019**, *15*, 1463–1475.
2. Yañez, O.; Vásquez-Espinal, A.; Pino-Rios, R.; Ferraro, F.; Pan, S.; Osorio, E.; Merino, G.; Tiznado, W. Exploiting Electronic Strategies to Stabilize a Planar Tetracoordinate Carbon in Cyclic Aromatic Hydrocarbons. *Chemical Communications* **2017**, *53*, 12112–12115, doi:10.1039/C7CC06248F.
3. Tiznado, W.; Perez-Peralta, N.; Islas, R.; Toro-Labbe, A.; Ugalde, J.M.; Merino, G. Designing 3-D Molecular Stars. *J Am Chem Soc* **2009**, *131*, 9426–9431.
4. Yañez, O.; Inostroza, D.; Usuga-Acevedo, B.; Vásquez-Espinal, A.; Pino-Rios, R.; Tabilo-Sepulveda, M.; Garza, J.; Barroso, J.; Merino, G.; Tiznado, W. Evaluation of Restricted Probabilistic Cellular Automata on the Exploration of the Potential Energy Surface of Be<sub>6</sub>B<sub>11</sub>-. *Theoretical Chemistry Accounts* **2020**, *139*, 41.