



Universidad de Panamá
Facultad de Informática, Electrónica y Comunicación



Asignación:
Preliminar del trabajo final

Asignatura:
Introducción a la Ingeniería

Estudiantes: Noel Pérez/EC-0157-11852
Samuel Concepción/8-1011-392
Raynell Castillo/8-1013.403

Fecha:
Martes, 18 de abril de 2023

Miras tras que después de la segunda guerra mundial nace una nueva era de llamada la guerra fría o guerra tecnológica de esa época nace una nueva era, junta con la QUÍMICA COMPUTACIONAL junto con los microchips; todo nace a finales de los años setenta por los químicos dedicados a la haría farmacéutica o medicamentos, esta química computacional se basa en la parte del desarrollo de nuevos elementos revolucionados para la oportunidad de la (industria 4.0, microchips o industria medica).

Nuestras partes de la química computacional en los microchips se basa en los comportamientos compuestos como el desarrollo del procesos de análisis de datos que puede establecer una teoría apropiada para las reglas de la fabricación de producto para fines automatizados para la ayuda de la mecatrónica en general, dentro de la lectura de la mecatrónica con la química computacional juntos con los microchips la automatización del eje de la mecatrónica junto con la química computacional nos brinda un buen análisis dentro del proceso de fabricación de los microchip. Este microchip es del método John Poble y Antoine Laurent Lavoisier hoy se basan en el análisis que la química computacional nos brinda junto a la mecatrónica una facilidad de elementos para un circuito o un modelo teórico de saber o rectificar posibles acontecimientos dentro de la medicina y teoría mecánica eléctrica.

Química computacional de microchip en Panamá

Panamá mediante su desarrollo en el laboratorio Gorgas su desarrollo en la química computacional junto con un microchip se ha mantenido estable en la área médica dentro de eso está los aparatos que brinda el Gorgas para el Hospital Nacional tales como nuevos aparatos detectores para la detección de anomalías en el cuerpo del paciente, también recalcamos que la química computacional de microchip es basado en la mecatrónica y la utilizamos en nuestra industria minera, marítima, portuaria para la fabricación de nuevos ejemplares automatizados de la industria utilizada en los diversos elementos que componen el núcleo en qué se puede utilizar la química computacional de microchip en Panamá un ejemplo; basta que el sistema de Bombeo del Canal de Panamá se basa hoy en la fabricación de una matriz junto con el microchip mecatrónico para adjuntar un modelo único con un elemento específico para el artefacto todo esto se da gracias a la Ingeniería Electrónica y más en la química computacional.

(Quimica_comutacional, n.d.)

Historia de la química computacional

El término "química computacional" fue mencionado por primera vez por Sidney Fernbach en su libro de 1970 *Computers and Their Role in Physical Science*. Sin embargo, antes de esta primera memoria, la química computacional había avanzado en las décadas desde la década de 1940 con soluciones para lidiar con las ecuaciones de onda de sistemas atómicos complejos. A principios de la década de 1950, se realizaron los primeros cálculos orbitales atómicos semiempíricos. Los químicos teóricos fueron muchos de los primeros en usar computadoras digitales. En 1960 se publicaron los primeros cálculos de conjuntos base mínimos y máximos para estudios sistemáticos. Los primeros cálculos poliatómicos utilizando funciones gaussianas se realizaron a fines de la década de 1950. Estos métodos empíricos fueron reemplazados por métodos semiempíricos en la década de 1960. A principios de la década de 1970, se comenzaron a utilizar programas informáticos eficientes para acelerar los cálculos iniciales de las trayectorias moleculares. En la década de 1970, varios métodos comenzaron a ser considerados como parte de un nuevo campo llamado química computacional.

La química computacional se usa comúnmente cuando los métodos matemáticos automatizados implementados en las computadoras están suficientemente desarrollados. En química teórica, los químicos, físicos y matemáticos desarrollan algoritmos y programas informáticos para predecir las propiedades atómicas y moleculares y las vías de reacción de las reacciones químicas. Los químicos computacionales, por otro lado, pueden aplicar el software y las técnicas existentes a problemas químicos específicos.

Las principales áreas de la química computacional son:

- Almacenamiento y recuperación de datos de entidades químicas.
- Determinar la correlación entre estructura química y propiedades (ver Relaciones cuantitativas estructura-propiedad y cuantitativas estructura-actividad).
- Enfoques computacionales que ayudan en la síntesis eficiente de compuestos.
- Un enfoque computacional para diseñar moléculas que interactúen con otras moléculas de maneras específicas.

La química computacional como disciplina

Esta disciplina abarca una gran diversidad de métodos y aproximaciones teóricas, también ha desarrollado una terminología propia, durante las dos últimas décadas, la química computacional ha pasado de ser un campo de investigación por un número reducido de pioneros a ser un área multidisciplinaria, que trasciende muchas divisiones habituales en química.

Este carácter transversal, paradójicamente, dificulta la delimitación de esta disciplina, a falta de una definición mejor, la más comúnmente aceptada es la propuesta por Paul von

Rague Schleyer en 1985, en el curso del Workshop on Molecular Mechanics celebrado en Ámsterdam en diciembre de 1985.

El concepto de química computacional de ha abierto camino por la vida de los hechos, y cada vez es más frecuente ver en la literatura química resultados computacionales publicados por su propia relevancia o conjuntamente con estudios experimentales. La química computacional se va incorporando paulatinamente a los planes de estudio de pregrado y postgrado.

(Dialnet-AplicacionDeLaQuimicaComputacionalAlAResolucionDeP-648969, n.d.)

Objetivos y características de la química computacional

El objetivo de la química computacional es predecir los tipos de propiedades moleculares de sistemas químicos y además ofrecer información para racionalizar o interpretar tendencias y mencionar relaciones de estructura y actividad.

Esto lo hace empleando una gran cantidad de técnicas teóricas en constante desarrollo, muchas de sus herramientas pueden ser usadas por todos tipos de científicos sin ser especialistas, claro que, se necesita un conocimiento básico de los métodos teóricos y tener capacidad de análisis crítico para los resultados, además de tener lo básico en el manejo de software (en este caso mientras mejor sea la habilidad se está más capacitado).

Sus principales herramientas

Mecánica molecular

una de sus herramientas son los métodos de la mecánica molecular, estos métodos estiman el cambio en la energía potencial de un sistema molecular como consecuencia de pequeñas variaciones en los distintos ángulos de enlace y de los cambios conformacionales y su formación y ruptura.

los métodos de mecánica molecular nos permiten simular exhaustivamente el comportamiento dinámico y las propiedades termodinámicas de las fases condensadas. Sus principales limitaciones son que no proporcionan ninguna información o propiedad electrónica y su ámbito de aplicación viene predeterminado por los potenciales y parámetros empleados, en otro lado una de sus ventajas son que tienen gran rapidez y son muy eficientes en fases condensadas.

Métodos ab initio

Estos métodos resuelven aproximadamente la ecuación de Schrödinger para mantener la energía y a función de onda electrónica del sistema de Interés. Se llaman desde la initio porque no usan otra información empírica que no sea la de las constantes físicas fundamentales, los métodos ab initio están relacionados también con la química cuántica, partiendo del método variacional Hartree-Fock de calculo de orbitales moleculares, del cual es posible formular familias de métodos ab initio.

Este método tiene la desventaja de que son lentos, y los mas avanzados son muy complicados de usar, pero también trae ventajas como la exactitud y precisión controlable.

Métodos de la teoría del funcional de la densidad

Este es uno de los métodos mas populares, estos formulas el problema mecano cuántico de la estructura electrónica en términos de una magnitud observable, la implementación de este método conduce a las ecuaciones de Khon-Sham, que son bastante semejantes a la de Hartree-Fock porque la densidad electrónica se expresa a partir de orbitales moleculares, por otro lado este método de la estructura electrónica debe distinguirse del método mecánico - estadístico del mismo nombre aplicado al estudio del fenómeno de adsorción teniendo en común ambas teorías que se basan en una descripción efectiva de la densidad electrónica, en un caso, y de la densidad de un fluido adsorbido, en el otro.

Los métodos de la teoría del funcional de la densidad son la opción por defecto en Química computacional para simular todo tipo de sistemas moleculares. En particular, la caracterización de las propiedades bulk y superficiales de los materiales cristalinos se ha beneficiado enormemente de los métodos de la teoría del funcional de la densidad en combinación con el Teorema de Bloch que incorpora la simetría cristalina en la Química computacional. No obstante, las desventajas de los métodos de la teoría del funcional de la densidad deben tenerse presentes a la hora de utilizarlos: (a) la dificultad en seleccionar el funcional más adecuado; (b) la imposibilidad de refinar sistemáticamente los resultados de los métodos de la teoría del funcional de la densidad como sí que es posible con los métodos ab initio; y (c) los errores sistemáticos de muchos funcionales como es la carencia total o parcial de energía de dispersión (que juega un papel clave en los materiales de carbono) en un cálculo de la teoría del funcional de la densidad.

Extracto de la parte molecular de la química computacional en un microchip biológicos

Estructura principal que desarrolla la característica dentro de una molécula o una microbiología en sí como mencionamos la microbiología la ligamos con los microchip el microchip en la área de la química computacional nos brinda la detención y análisis de cualquier anomalía indisputada en cualquier área de un organismo la química computacional junto con la microchip dentro de desarrollo de la mecatrónica se da como fin de mejorar y minimizar las áreas computacionales para la ayuda a tener mejor entendimiento del proceso químico como la sustancia nucleofílica y vicarius en el mecanismo de reacción de la biodegradación la aneto de desarrollo anti microchip o antimicrobianos nos brinda en la parte científica biológica una herramienta poderosa para la experimentación con fines biológicos en la química computacional.

Desarrollo de microchip mecatrónico un mecatrónico figura la electrofilia global para la composición de un buen desarrollo a micro composición en diversas áreas principalmente en las máquinas automatizadas, la autenticidad de las máquinas automatizadas da a la figura y a la firmeza de un microchip subdesarrollado con base de mecanismo de ración Es identificado como área de hola proceso análogo mediante códigos de base de datos de una x empresa la parte automatizada del microchip dentro de la empresa nos brinda un desarrollo factible en la área de producción o estructura fija de cualquier mecanismo de acción.

Componente básico para un concepto clave de cómo en ejemplo nanotecnología de microchip

La innovación del desarrollo de la mecatrónica junto con la química computacional no has dado una gran área cómo podemos mencionar nanoquímica gracias a los microchip de secuencia automatizadas esta área minúscula nos brinda un buen modelado y un buen comportamiento de la nanotecnología conductora hacia la química computacional en microchip los nano chip dentro de la industria nos brinda la facilidad de demanda dentro del nivel molecular de una máquina automatizada ya que consiste en el sistema de nanométricos por análisis de base de datos para la facilitación de buen subdesarrollo empresarial, esta creación por manos de mecatrónico brinda a la humanidad un ritmo inusual para la robótica avanzada en la industria médica, biológica y fábricas; todo esto formas se componen diversas castas de diferentes medidas de fabricación de microchip para la área correspondida.

Referencias

N A T U R A L I S

De B, Coordinación L,
Química Y (2018)

Formación en química computacional y sus aplicaciones a través de un proyecto de investigación desarrollado en la Patagonia chilena Oyarzún-Aravena A, Moya-Barría I, Navarro-Pérez D *Formacion Universitaria* (2022) 15(2) 103-116

Bol. Grupo Español Carbón

Suárez D

quimica_computacional

Química computacional _ AcademiaLab. (n.d.). <https://academia-lab.com/enciclopedia/quimica-computacional/>