



# QUÍMICA COMPUTACIONAL EN MICROCHIPS



Noel Pérez/EC-0157-11852  
Samuel Concepción/8-1011-392  
Raynell Castillo/8-1013-403

## Resumen de introducción

La estructura de las partes fundamentales de la química computacional con su apartado en los (Microchips) es donde el ser humano desarrolla la parte de la estructura de como una ecuación estructura para tención dentro de los fines del desarrollo de un sistema unitario con el futuro.

## Historia de la química computacional

El término "química computacional" fue mencionado por primera vez por Sídney 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.

Mirando al pasado notamos que después de la segunda guerra mundial, la guerra fría o guerra tecnológica de esa época nace una nueva era, junta con la QUÍMICA COMPUTACIONAL y con los microchips; todo nace a finales de los años setenta por los químicos dedicados al área farmacéutica, 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 médica.

## Exponiendo la disciplina

La química computacional como 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 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 juntamente con estudios experimentales. La química computacional se va incorporando paulatinamente a los planes de estudio de pregrado y postgrado.

### Química computacional en microchips

Nuestra parte 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 recalamos 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.

(Química\_computacional, n.d.)

## 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 nos ha 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 nanochips 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 de diversas castas de diferentes medidas de fabricación de microchip para la área correspondida.

## 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).

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.

## Entre las principales herramientas que podemos mencionar están:

### 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 cálculo de orbitales moleculares, del cual es posible formular familias de métodos ab initio .

Este método tiene la desventaja de que son lentos, y los más 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 más populares, estas fórmulas 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 absorción 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[3].

## 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 indispuesta 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 vicarios 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.

## Pasos para la Fabricación de un Circuito Integrado formado por Silicio como componente activo

Preparación de la oblea

El material de partida para los circuitos integrados modernos es silicio de muy alta pureza, que toma la forma de cilindros sólidos de color gris acero.

Oxidación

Se refiere al proceso de reacción química del silicio y el oxígeno para formar dióxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ). Para acelerar esta reacción, se requiere un horno especial ultra limpio de alta temperatura. El oxígeno utilizado en la reacción se introduce como un gas de alta pureza (proceso de "oxidación seca") o vapor ("oxidación húmeda").

## Difusión

Durante el proceso de fabricación, la difusión es el método de introducción de átomos de impurezas en el silicio para cambiar su resistividad, por lo tanto, para acelerar el proceso de difusión de impurezas, se realiza a alta temperatura (1000 a 1200 °C) para obtener el dopaje deseado. La difusión a manera aclaratoria es el proceso por el cual los átomos se mueven a través de un cristal semiconductor desde regiones de alta concentración a regiones de baja concentración

## Implantación de iones

Es otro método utilizado para introducir átomos de impurezas en cristales semiconductores. Un implantador de iones genera iones del contaminante deseado, los acelera a través de un campo eléctrico y hace que golpeen la superficie del semiconductor. Este proceso suele utilizarse cuando el control preciso del perfil de dopaje es fundamental para el funcionamiento del dispositivo.

## Deposición por medio de vapor químico

Es un proceso en el que un gas o vapor sufre una reacción química que da como resultado la formación de un sólido sobre un sustrato. Las capas de óxido depositadas por la fase de vapor químico no funcionan tan bien como los óxidos formados térmicamente, pero son suficientes para actuar como aislantes térmicos.

## Metalización

Su propósito es conectar varios componentes para formar el circuito integrado deseado. Esto implica la deposición inicial de metal sobre la superficie de silicio. El espesor de la película de metal se puede controlar mediante el tiempo de pulverización, que suele ser de 1 a 2 minutos.

## Fotolitografía

Esta técnica se utiliza para determinar la geometría superficial de varios componentes de circuitos integrados. Para lograr la fotolitografía, la oblea primero debe recubrirse con una capa sensible a la luz llamada fotoprotector mediante una técnica llamada "recubrimiento por rotación"; A continuación, la capa fotosensible se expone selectivamente a la luz ultravioleta utilizando una placa fotosensible estampada Down. Las áreas de contraste se aplanan y se pueden eliminar con productos químicos, lo que da como resultado geometrías de superficie muy precisas.

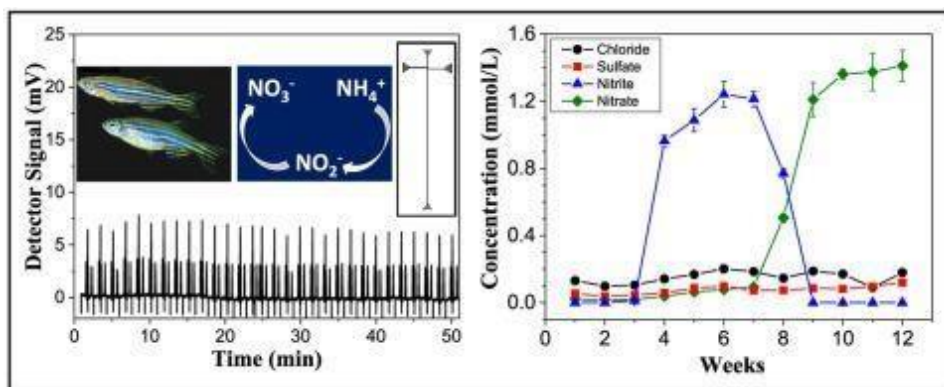
Una foto protección puede utilizar para proteger los materiales del grabado húmedo o de iones reactivos. Este requisito para el equipo de fotos crea restricciones mecánicas y visuales muy importantes.

## Empacado

Una oblea de silicio puede contener cientos de circuitos o chips terminados, cada uno de los cuales puede contener 10 o más transistores en un área rectangular, generalmente entre 1 milímetro y 10 milímetros en cada lado. Después de probar eléctricamente los circuitos, se separan entre sí y los circuitos buenos se ensamblan en cápsulas. Los cables dorados generalmente se usan para conectar los terminales del paquete al patrón de superposición de la camioneta; finalmente, el envase se sella con plástico o epoxi al vacío o en atmósfera inerte.

## Desarrollo compuesto en microchip en química

Dentro de la función de la química se desarrolló a mediados del siglo XIX con el fin de mejorar el sector salud esto da a que hubieron varios cambios dentro de la química del sector salud cómo las actualizaciones de nuevos equipos microscópicos y análogos para detectar funciones anormales del sistema inmunológico del ser humano; el desarrollo de la química computacional nos brindó en el sector salud con el inicio de los microchip unos de los nuevos planes tales como las pantalla análogas en el sector ya que las analogía nos brinda un desarrollo de una mayor vista del patógeno o de la enfermedad del ser humano que presenta en el momento hoy en día es bueno ver que la química computacional dentro del sector salud nos da una gran variedad extraordinaria en nueva detecciones de enfermedades . Para desarrollo fina de la química computacional en microchip no es limitada sin embargo siempre habrá un nuevo objetivo con él análisis de microchip en química.



## Estado actual de la electroforesis de microchip

La electroforesis de microchip es la combinación del factor de laboratorio para facilitar la el procedimiento analítico de laboratorio en un sistema micro fluido esto da que la técnica junto con la microchip hoy se basa dentro de una base subdesarrollada para detención analítica en laboratorio litográfico la cromatóforos de gases a disminución de radiación para el comportamiento del ser humano gracias a este estado no han desarrollado nuevos suplementos para combatir el la radiación en la parte de la agua potable con los microorganismos.

## Conclusión

En la estructura de la Química Computacional en los microchips no damos abasto como el conocimiento de la ciencia que estudia la fabricación de microprocesadores controladores dentro de la industria automatizada 4.0 esta industria nos brinda la fase de desarrollo hoy en día al componer una estructura rígida dentro de la mecatrónica; La química computacional dada como desarrollo en microchip es todo el estudio de cómo es el elemento, la fabricación y la forma de emplear dentro de la automatización de la industria 4.0 en la mecatrónica.



## Referencias

- [1] A. Román y A. Pérez. "BOLETÍN DE LA COORDINACIÓN DE FÍSICA Y QUÍMICA". DIVISION DE CIENCIAS BASICAS. [http://www.dcb.unam.mx/Publicaciones/Naturalis/bfyq\\_29.pdf](http://www.dcb.unam.mx/Publicaciones/Naturalis/bfyq_29.pdf).
- [2] A. Oryazun, I. Moya y D. Navarro. "Formación en la química computacional y sus aplicaciones a través de un proyecto de investigación desarrollado en la Patagonia chilena". SciELO - Scientific electronic library online. [https://www.scielo.cl/scielo.php?pid=S0718-50062022000200103&script=sci\\_arttext](https://www.scielo.cl/scielo.php?pid=S0718-50062022000200103&script=sci_arttext).
- [3] Suarez D. "Objetivos y características de la química computacional y su aplicación al estudio de los materiales de carbono | DIGITAL.CSIC". Grupo Español Del Carbón. <https://www.gecarbon.org/boletin.asp>.
- [4] G. Cuevas, "Química computacional", *Revista ciencia mx*, pp. 33–40, 2005. [En línea]. Disponible: [https://www.revistaciencia.amc.edu.mx/images/revista/56\\_2/quimica\\_comutacional.pdf](https://www.revistaciencia.amc.edu.mx/images/revista/56_2/quimica_comutacional.pdf)
- [5] "Química computacional \_ AcademiaLab". Home | AcademiaLab. <https://academia-lab.com/enciclopedia/quimica-computacional/>.
- [6] Colaboradores de los proyectos Wikimedia. "Fabricación de circuitos integrados". Wikipedia, la enciclopedia libre. [https://es.wikipedia.org/wiki/Fabricación\\_de\\_circuitos\\_integrados](https://es.wikipedia.org/wiki/Fabricación_de_circuitos_integrados).
- [7] C. Freitas, R. Moreira, M. Tavares y W. Coltro, "Monitoring of nitrite, nitrate, chloride and sulfate in environmental samples using electrophoresis microchips coupled with contactless conductivity detection, *Talanta*", vol. 147, n.º 1, pp. 335–341, 2016. Disponible: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039914015303660>
- [8] E. Castro y A. Manz, "resent state of microchip electrophoresis: State of the art and routine applications", *J. Chromatogr. A*, vol. 1382, n.º 1, pp. 66–85, 2015. Disponible: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021967314017920>