



Vamos a comenzar en breve, a las 1 CST / 3 EST



El Tercer Webinar en Español auspiciado por el ACS y la SQM

www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/spanish/quimica-computacional

1



¿Tiene preguntas?



“¿Por qué he sido “silenciado”?”

No se preocupe. Todo el mundo ha sido silenciado, excepto los presentadores y la moderadora. Gracias, y disfruten de la presentación.

Escriba y someta sus preguntas durante la presentación

2



¿Está en un grupo grande hoy?



Díganos de dónde son ustedes y cuántas personas están en su grupo!

3



La Diversidad de la Audiencia



Hoy tenemos representantes de 17 países!

4



La Oficina de Actividades Internacionales

American Chemical Society → Global Community → International Activities → Chapters

Global Community

International Activities

- Travel to the US
- Travel from the US
- Meetings & Activities
- Int'l Exchange & Funding
- Global Alliances & Partnerships

Chapters

- Science & Human Rights
- Newsletter
- ACS International Center
- International Year of Chemistry 2011

International Chemical Sciences Chapters

ACS works to advance the field of chemistry around the world. Scientists outside the United States have formed International Chemical Sciences Chapters (ICSCs) to allow chemists within a geographic area to connect with one another, as well as ACS members around the world. Forming a chapter brings additional benefits to international members, beyond what they already enjoy as members of ACS.

Current Chapters:

- Hong Kong
- Hungary
- Malaysia
- Romania
- Saudi Arabia
- Shanghai
- South Africa
- South Korea
- Thailand

Establish a Chapter in Your Region

ACS encourages its international members to consider forming an ICSC as a means of staying connected with scientists in their region, and with the ACS membership around the world.

[Find out how to establish an International Chemical Sciences Chapter.](#)

ACS Network

Connect with peers around the world on the [ACS Network!](#)

Calendar of Events

[C&EN Calendar](#)

ACS in your language

[ACS in Chinese](#)

[ACS in Spanish](#)

Grants and Awards

International Chapters are eligible for a number of awards and grant opportunities issued by ACS. Find out more information about them here:

[Partners for Progress and Prosperity Award](#)

[Global Innovation Grant](#)

 International Activities www.acs.org/ic

5



Sociedad Química de México



La Sociedad Química de México, A. C., es una Organización Nacional fundada el 16 de marzo de 1956 y constituida el 27 de agosto del mismo año, por un grupo de ilustres químicos encabezados por los Químicos Rafael Illescas Frisbie y José Ignacio Bolívar Goyanes, los Ingenieros Químicos Manuel Madrazo Garamendi, Guillermo Cortina Anciola, y la QFB, María del Consuelo Hidalgo Mondragón.

www.sqm.org.mx

6



Sugieran temas y expertos que les interesarían para el próximo webinar



acswebinars@acs.org

www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/spanish

7



Inscribirse para el ultimo ACS/SQM Webinar en Español



***“Panorama de la Iniciativa Empresarial:
Guía Para el Químico Emprendedor”***

18 de noviembre @ at 1pm CDT

Javier García Martínez, Co-fundador y Director Científico, Rive Technology, Inc.

Ingrid Montes, la Junta de Directores, American Chemical Society

www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/spanish/quimico-emprendedor

8



**“Panorama de la Química Computacional:
Los Químicos Teóricos Estudiarán Si Como Roncan Duermen”**



Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/QuimicaComp>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society,



Carlos Amador Bedolla

Nació en la Ciudad de México en junio de 1960. Obtuvo la licenciatura en Química (1983), la Maestría (1984) y el Doctorado (1989) en Ciencias Químicas en la Facultad de Química (UNAM). Realizó estancias posdoctorales en Case Western Reserve University (Cleveland, 1990-1992) y la Universidad de California (Berkeley, 1994) y estancias sabáticas en la Universidad de California (Berkeley, 2005-2006) y la Universidad de Harvard (2007, 2010 y 2013-2014).



Carlos Amador Bedolla



Ha impartido más de 120 cursos en la Facultad de Química y en la FES-C en 38 materias distintas de las áreas de Química Teórica, Fisicoquímica, Matemáticas, Química Inorgánica, Química de Materiales y Materias Sociohumanísticas.

Actualmente Estructura de la Materia y Química Cuántica II en licenciatura y Seminario de Transferencia de Carga en doctorado. Compartió la responsabilidad de la materia Physical Sciences en la Universidad de Harvard con Alán Aspuru-Guzik (2014). Ha dirigido 22 tesis de licenciatura, maestría y doctorado.

12



Carlos Amador Bedolla



Ha publicado cerca de setenta artículos de investigación en las áreas de química computacional, educación y cambio climático. Publicó el libro “La huelga del fin del mundo” (Planeta, 2000) sobre política universitaria y “El mundo finito: desarrollo sustentable en el siglo de oro de la humanidad” (FCE, 2010) sobre temas de sustentabilidad. Ha publicado cerca de treinta artículos de colaboración en revistas diversas sobre temas de ciencia y política científica y académica. Escribió y presentó el programa “Derriba N obstáculos matemáticos” producido por la CUAED que fue exhibido por TVUNAM (2001-2003). Es miembro del Sistema Nacional de Investigadores del CONACyT desde 1984, actualmente con el nivel II.

13



Alán Aspuru-Guzik



El Profesor Alán Aspuru-Guzik es actualmente Profesor de Química y Biología Química en la Universidad de Harvard, donde comenzó su carrera independiente en 2006 y promovido a profesor asociado en 2010 y profesor titular en 2013. Alán recibió su licenciatura en Ciencias Químicas por la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) en 1999. Recibió la Medalla Gabino Barreda por la UNAM. Recibió su Doctorado en fisicoquímica de UC Berkeley en 2004.

14



Alán Aspuru-Guzik



El Profesor Alán Aspuru-Guzik lleva a cabo investigaciones en la interfaz de la información cuántica y la química. En particular, está interesado en el uso de los cálculos y simuladores cuánticos para sistemas químicos. Ha estudiado el papel de la coherencia cuántica en la transferencia de energía excitónica en complejos fotosintéticos. Lleva a cabo investigaciones en la búsqueda de alto rendimiento de materiales orgánicos, especialmente los semiconductores orgánicos, la energía fotovoltaica, baterías orgánicas y diodos emisores de luz orgánicos.

15



Alán Aspuru-Guzik



El Profesor Alán Aspuru-Guzik ha recibido recientemente el DARPA Young Faculty Award y Henry Dreyfus Teacher Scholar y el Sloan Research Fellowship. Recibió el Premio Mentores Graduate Everett-Mendelsson y recibió el premio Outstanding HP Júnior Facultad por las Computadoras en la división de Química de la American Chemical Society. Fue seleccionado como Top Innovator Bajo 35 por el MIT Technology Review. En 2012, fue elegido como Fellow de la American Physical Society, y en 2013, recibió el Premio de Carrera Temprana ACS en Química Teórica.

16

¡Los Químicos Teóricos Estudiarán Si Como Roncan Duermen!



Carlos Amador Bedolla
Facultad de Química
UNAM, México



Alán Aspuru Guzik
Department of Chemistry and
Chemical Biology
Harvard University, USA

SQM/ACS Webinar
28 de octubre, 2015

16

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO CLICK EN
BREVE EN LA PANTALLA AZUL

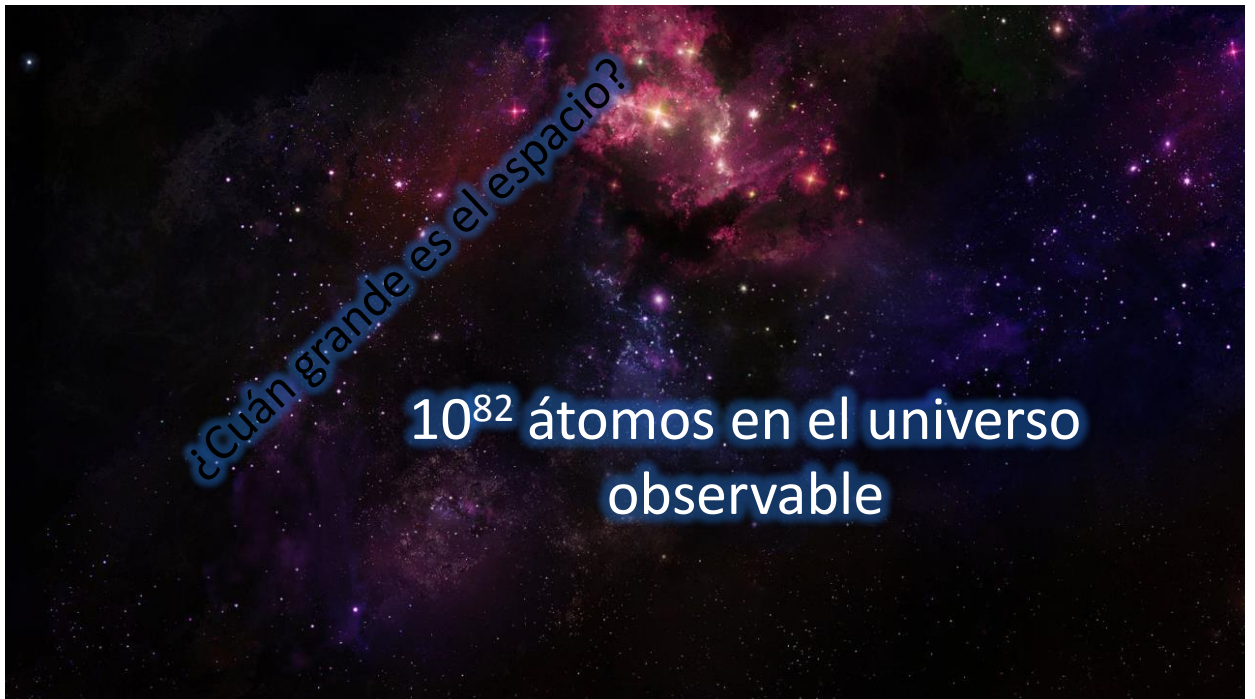


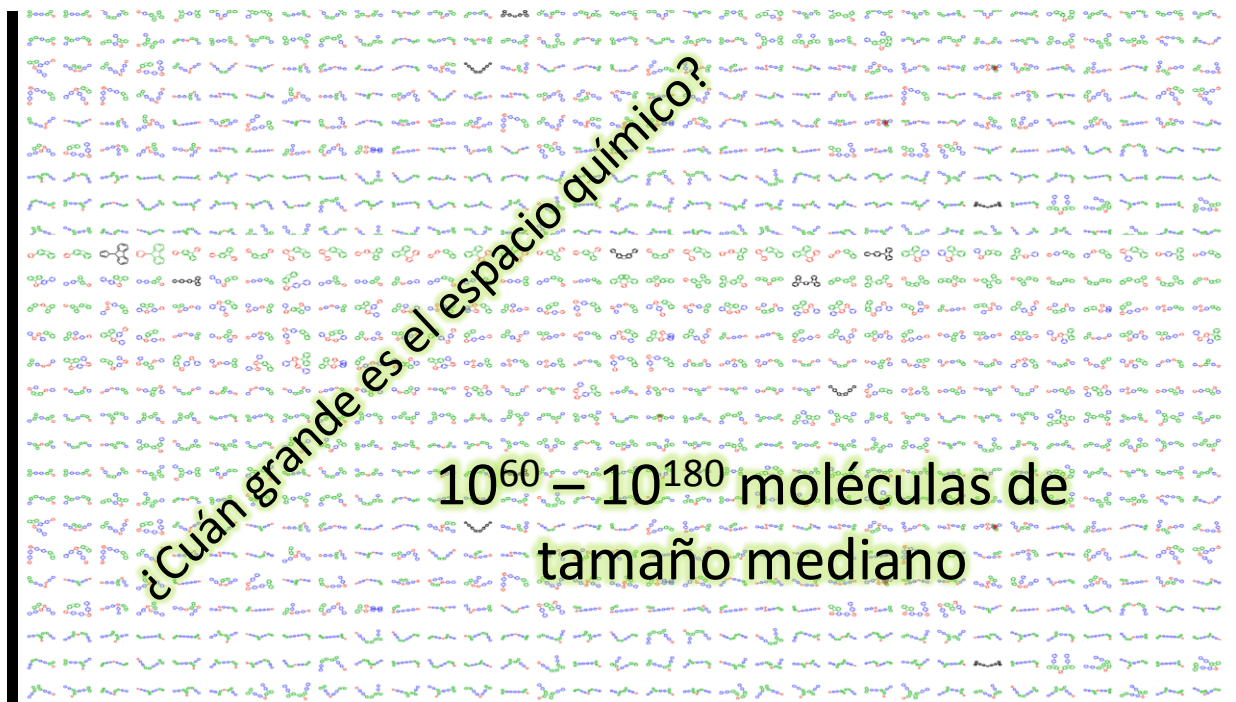
Pregunta prequímica...

“¿Cuántos átomos se estima que hay en el universo?”

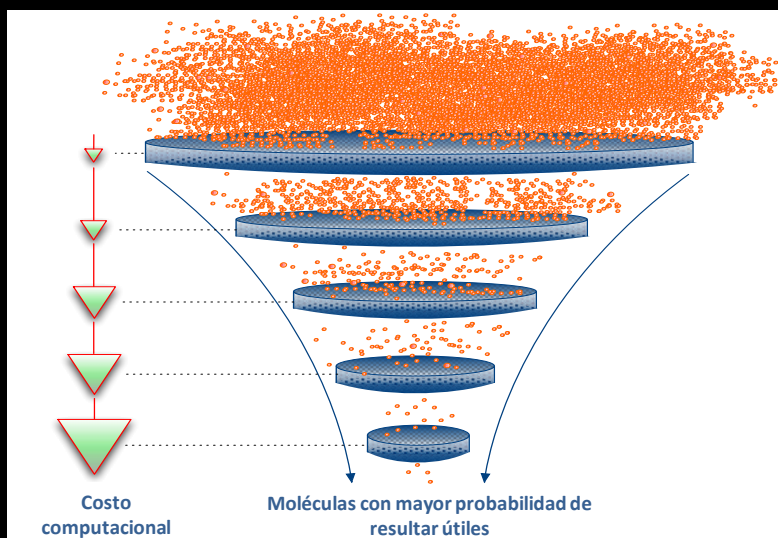
- 10^{40} or (10^{40})
- 10^{60} or (10^{60})
- 10^{80} or (10^{80})
- 10^{100} or (10^{100})
- 10^{120} or (10^{120})

17





De 10^{60} a 10^6 a 10^3 ...



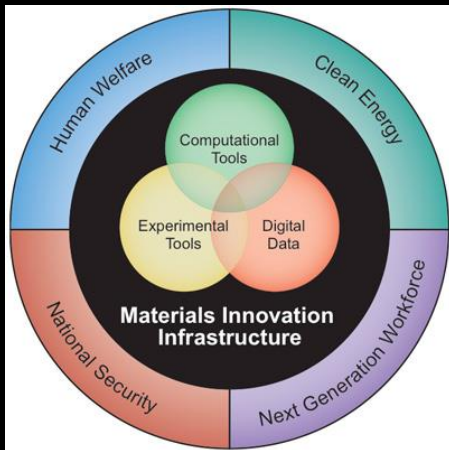
Biblioteca inicial

Selección computacional

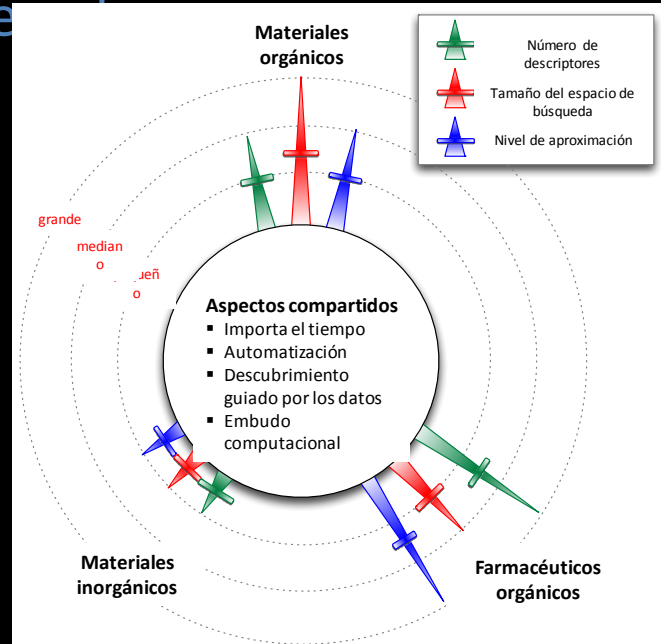
Síntesis y comprobación



Materiales orgánicos en un contexto más amplio



US Materials Genome Initiative



Encuesta Para La Audiencia

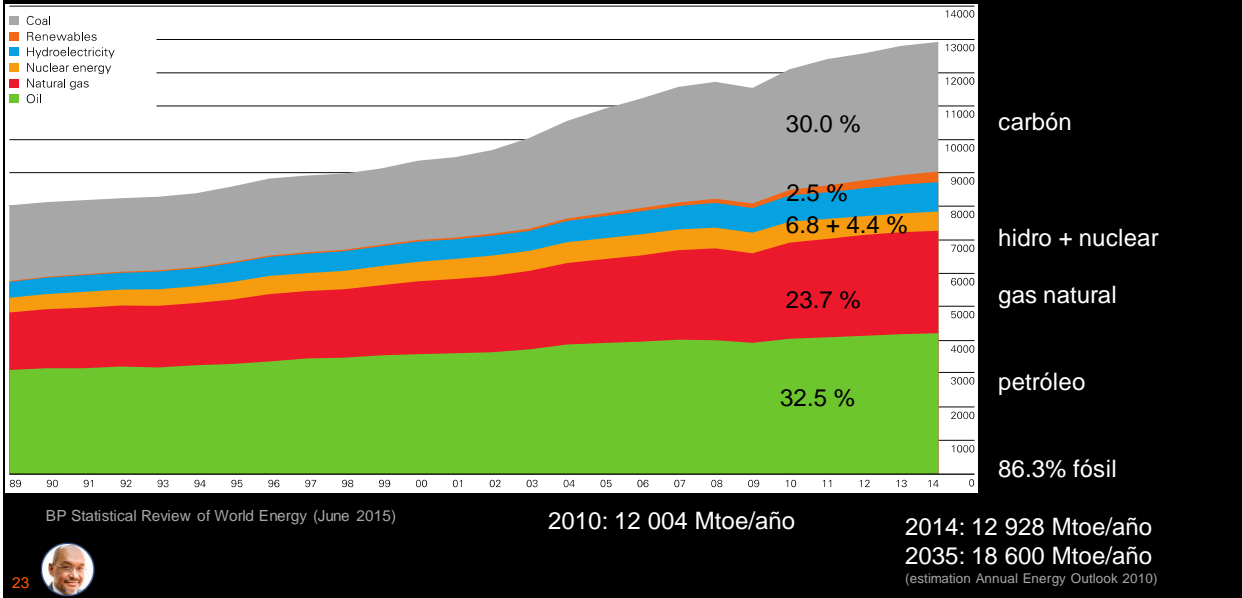
RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



“¿Qué fracción de la energía primaria que consume la humanidad proviene de la combustión de combustibles fósiles?”

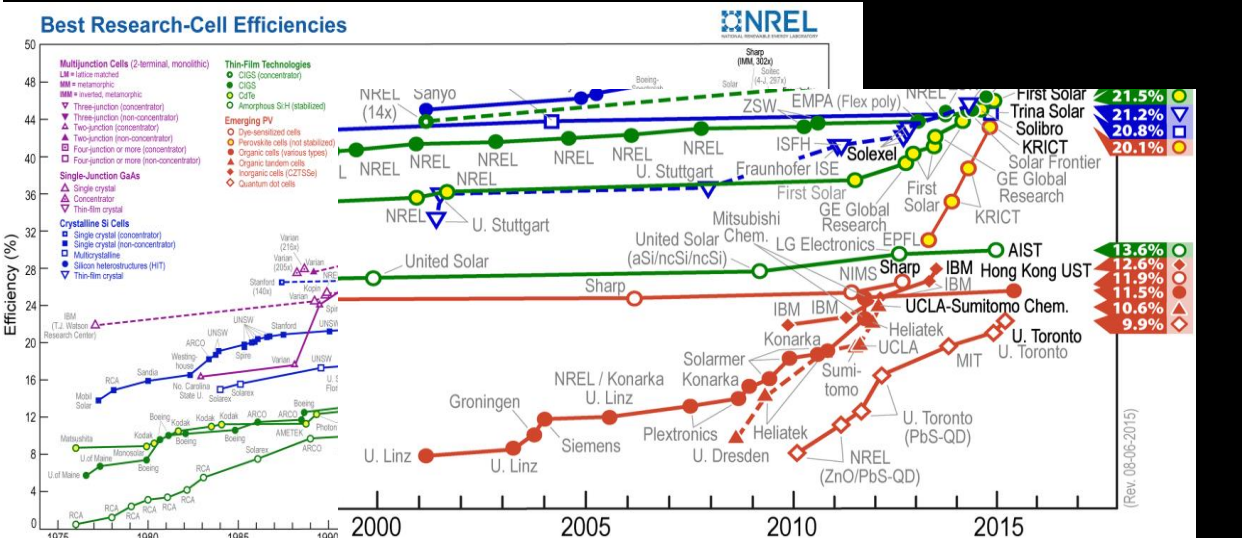
- Casi un tercio (30%)
- Casi la mitad (50%)
- Casi dos tercios (65%)
- Mas de cinco sextos (86%)
- Toda (100%)

Energía, Energía, energía... el Problema Central del Siglo XXI



23

Récords de Todos los Tiempos de Fotovoltaicos



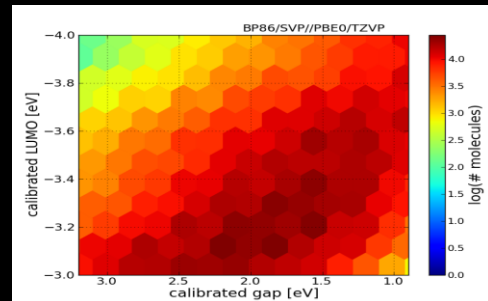
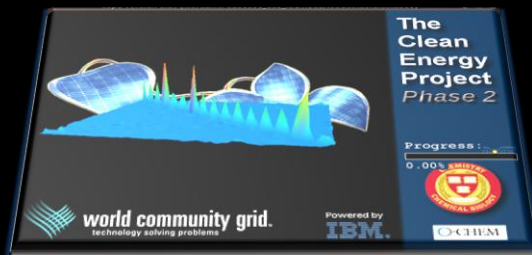
http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/3/35/Best_Research-Cell_Efficiencies.png (junio 2015)



24

El Proyecto de Energía Limpia de Harvard

El más ambicioso proyecto de selección química cuántica a la fecha



30,000+ años de CPU han permitido seleccionar más de 35,000 candidatos para fotovoltaicos de alto rendimiento

Colaboradores: Juan Hindo (IBM) Zhenan Bao (Stanford), Johannes Hachmann (Buffalo)



OPV's: Organic PhotoVoltaics (PVO's fotovoltaicos orgánicos)

Especialmente atractivas porque...

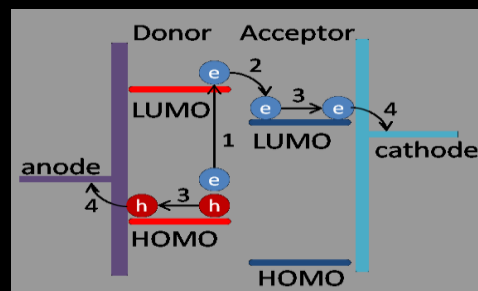
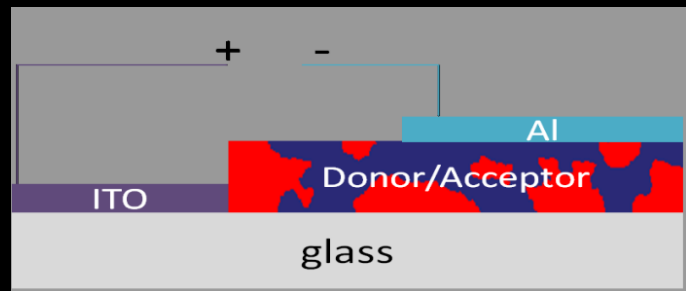
- sus elementos constitutivos son abundantes (CHONSPSeSi)
- su síntesis orgánica es ambientalmente correcta
- la tecnología de síntesis y producción es masiva y está bien establecida
- la tecnología de instalación es masiva y está bien establecida



OPV's: Mecanismo de Producción de Energía

De la absorción del fotón a la recolección en los electrodos

- absorción de fotón
- formación del excitón
- difusión del excitón
- disociación del excitón en la interfase donador-aceptor
- transporte de carga
- recolección de la carga en los electrodos



27

OPV's: Parámetros de Eficiencia

Eficiencia de conversión de potencia (%PCE)

$$\%PCE = P_{out} / P_{in}$$

Potencia de salida: max corriente, max voltaje

$$\%PCE = J_m V_m / P_{in}$$

Factor de llenado, corriente de circuito cerrado, voltaje de circuito abierto

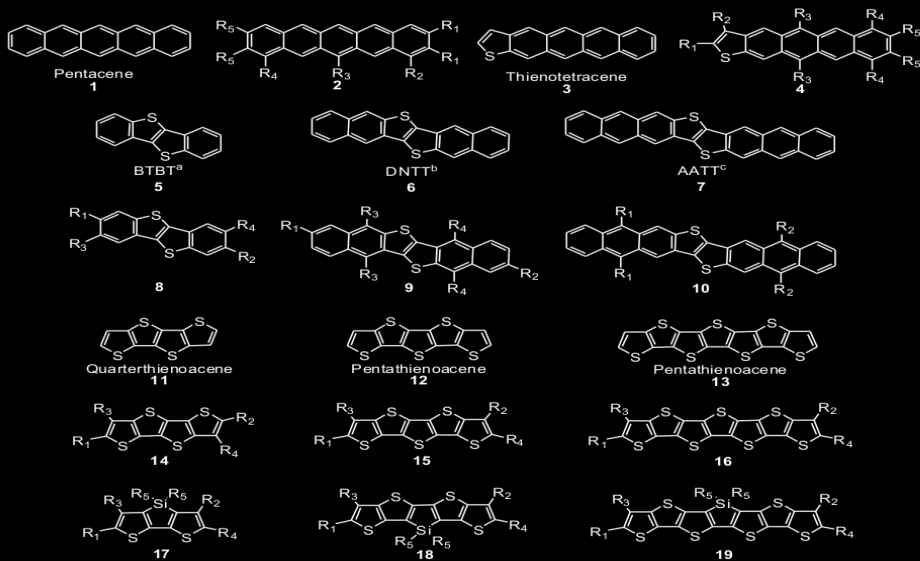
$$FF = J_m V_m / J_{sc} V_{oc}$$

$$\%PCE = FF J_{sc} V_{oc} / P_{in}$$



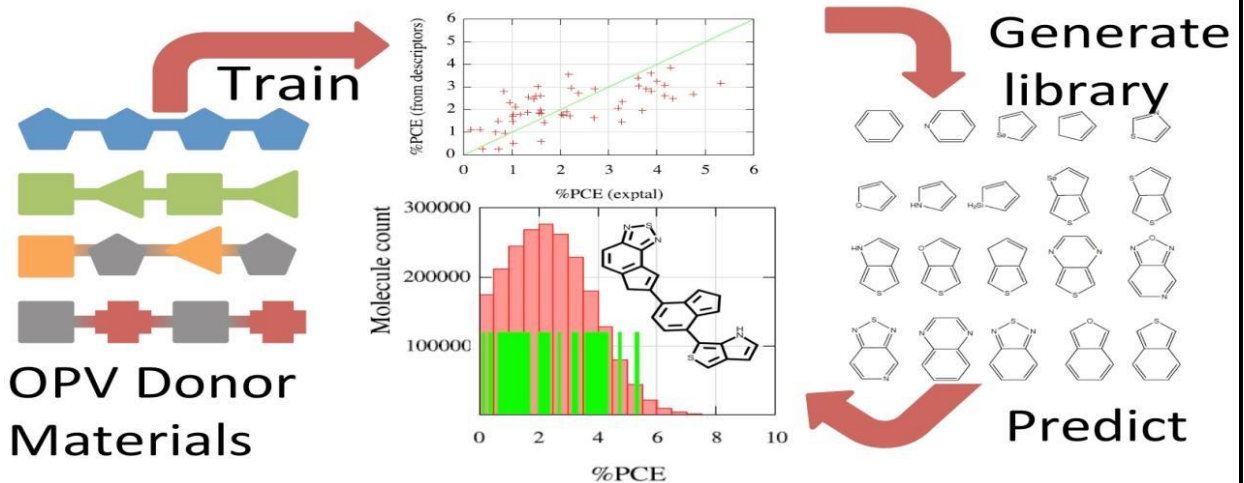
28

OPV's: Algunos Monómeros Prometedores



29

¿Cómo Buscar los Mejores Donadores?



30

¿Cómo buscar los mejores donadores?

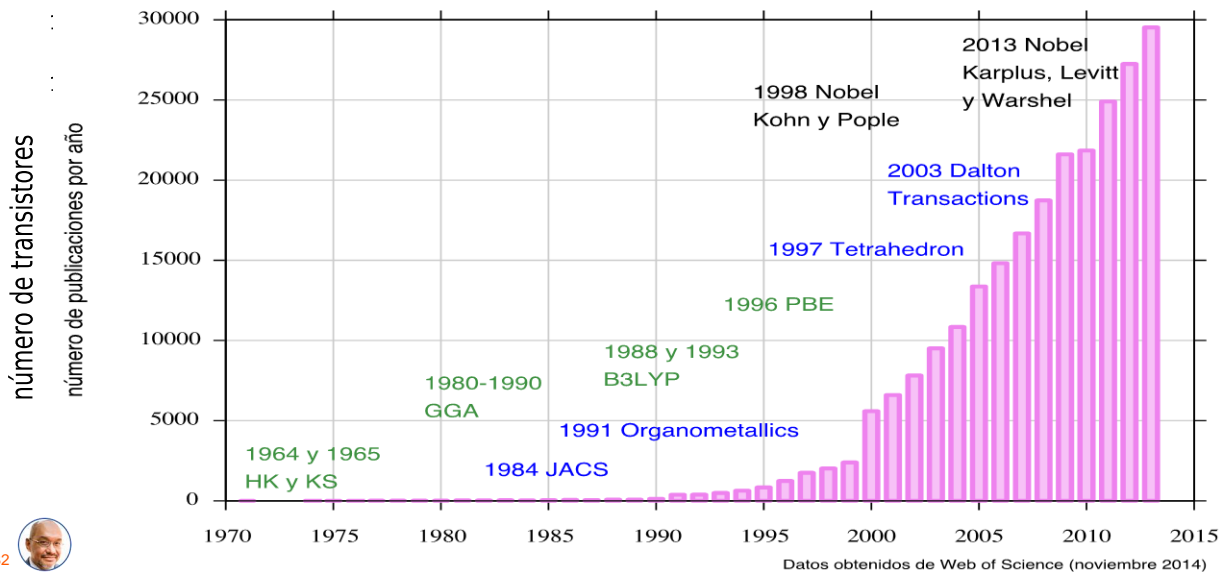
- búsqueda computacional (*in silico*)
- unidades de heterociclos ligadas y fusionadas
- cálculos químico-cuánticos (HF, DFT, post-HF, otros)
- ¿cuántas moléculas calcular?
- ¿cuántas unidades combinar?
- ¿cómo calcular eficientemente tantas moléculas?
- ¿qué calcular para cada molécula?



31

La Edad de Oro de la Química Computacional

DFT en la historia reciente



32



¿Cómo Calcular Millones de Moléculas?

- Harvard Clean Energy Project (Alán Aspuru-Guzik PI)
- cómputo distribuido (*screensaver*)
- IBM World Community Grid (<http://www.worldcommunitygrid.org>)
- <http://www.worldcommunitygrid.org/The> Clean Energy Project



33

¿Qué Calcular Para Cada Molécula?

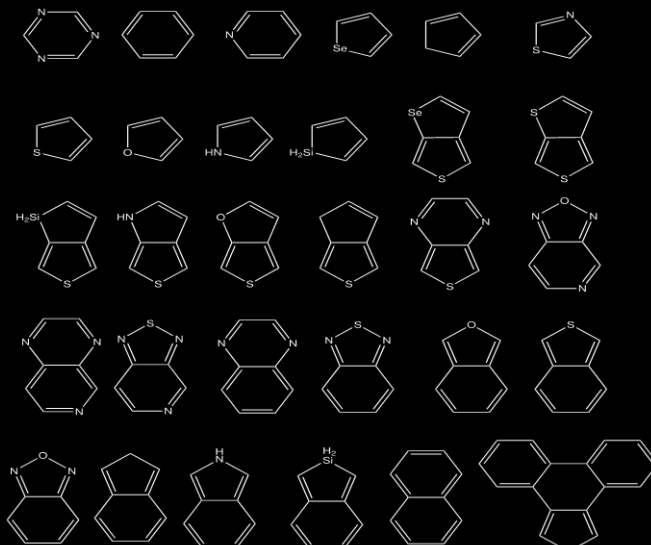
- estimación empírica de la geometría seguida de optimización (BP86, SVP)
- conjuntos de base distintos: SVP, TZVP
- diferentes implementaciones de DFT: BP86, PBE0, M062X, BHandHLYP, B3LYP
- cálculos restringidos y no restringidos
- 16 cálculos distintos de QChem por molécula



34

¿Qué Conjunto de Unidades Básicas Combinar?

- 30 unidades de heterociclos básicos
- (fusionados, ligados, mezclados) en (dímeros, trímeros, tetrameros)
- 2,671,405 moléculas distintas, sin repeticiones, sin ausencia de moléculas posibles
- cada molécula como una cuerda de **smiles**



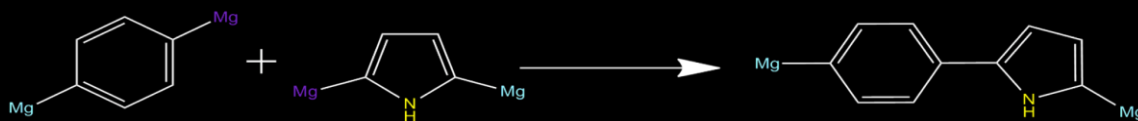
(**smiles**: simplified molecular input line entry specification)



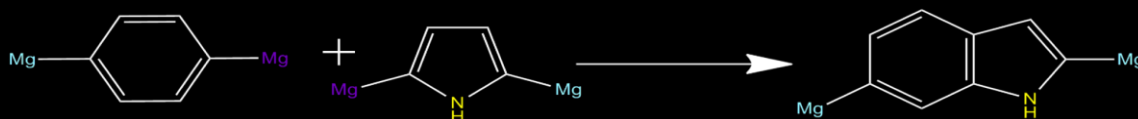
35

¿Cómo Armar las Moléculas?

- smiles y **smarts**
- síntesis computacional *à la Grignard*
- ligado: c1ccccc1-c1ccc[nH]1



- fusionado: c1cccc2c1[nH]cc2



(**smarts**: smiles arbitrary target specification)



36

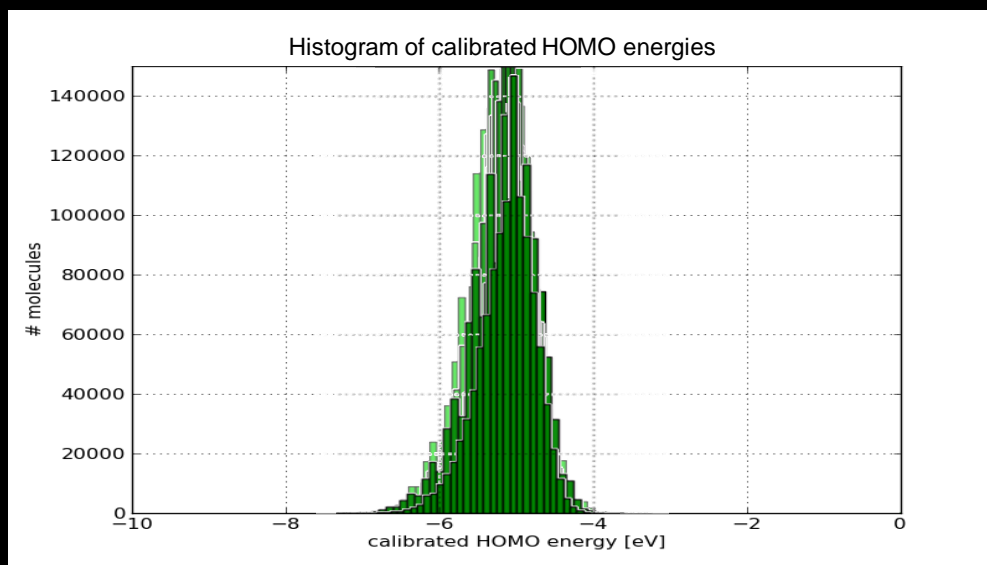
¿Cuántas Moléculas Armamos?

Products	Molecules
FF	230
FFF	3,903
FFFF	64,525
Total Fused	68,658
F-F	861
F-F-F	33,989
F-F-F-F	1,345,620
Total Linked	1,380,470
F-FF	15,889
FF-FF	59,682
F-FFF	267,447
F-F-FF	879,259
Total Hybrid	1,222,277
Total	2,671,405



37

Resultados del Cómputo Distribuido



38

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO CLICK EN
BREVE EN LA PANTALLA AZUL

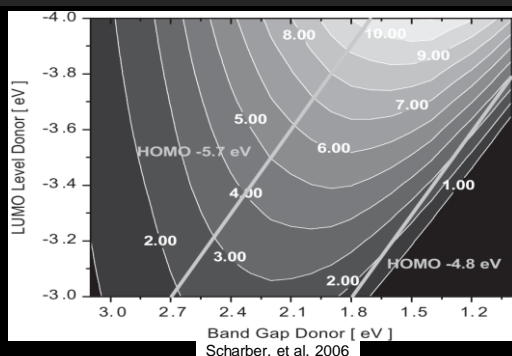


“¿De qué tamaño es una brecha ---diferencia entre HOMO y LUMO--- típica en moléculas orgánicas electrónicas?”

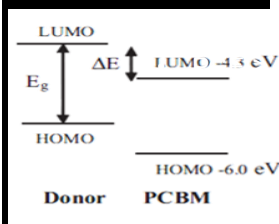
- Menos de 1 eV (approx 0.04 Ha)
- Entre 1 y 3 eV (por ahí de 0.10 Ha)
- Mas de 3 eV pero menos de 10 eV
- Más de 10 eV (cerca de 1 Ha)

39

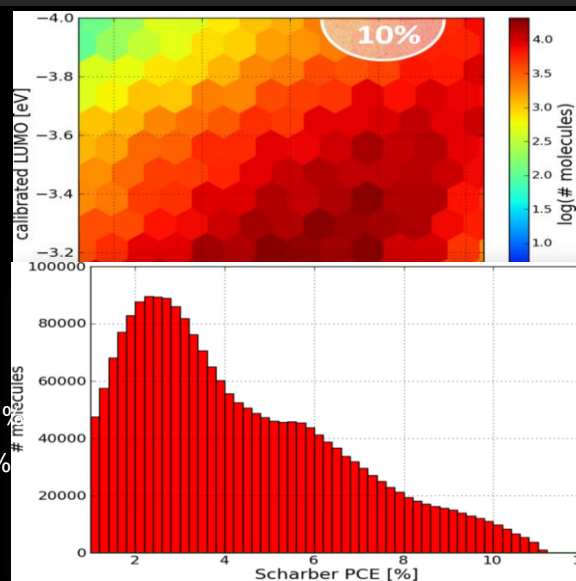
Resultados del cómputo distribuido: gráfica de Scharber



Scharber, et al. 2006



1%: 1,000 candidates (0.04%)
10%: 35,000 candidates (1.5%)



40

A la síntesis: El Equipo Frontera (en preparación)

UNAM

Carlos Amador (FQ)
 Miguel Robles (IER)
 Norberto Farfán (FQ)
 Alfredo Vázquez (FQ)
 Martha Albores (FQ)
 Gustavo García (FQ)
 Gustavo Ávila (FQ)
 Carlos Rius (FQ)
 Margarita Romero (FQ)
 José Manuel Méndez (FQ)
 Hector García (FQ)
 Blas Flores (FQ)
 Marcos Hernández (IQ)
 José Guadalupe López (IQ)
 Luis Demetrio Miranda (IQ)
 Víctor Ugalde (FQ)
 Hailin Zhao (IER)
 Marina Rincón (IER)
 Margarita Miranda (IER)



CInvEstAv

Eusebio Juaristi
 Armando Ariza
 Tere Mancilla
 Rosa Santillán

CIO

José Luis Maldonado

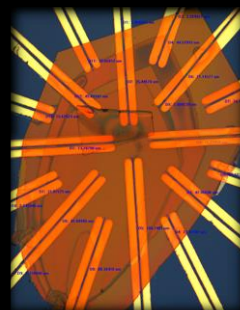
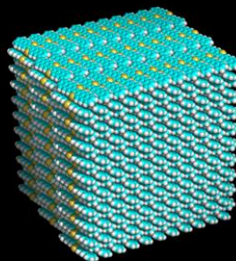
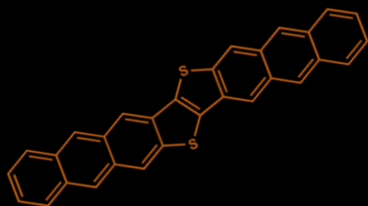
UAM

Ignacio González



41

Del cálculo *in silico* al carbón (molécula orgánica) al aparato



Se diseñaron y seleccionaron **ocho** materiales en la computadora, se sintetizó y evaluó **una**.

crystal DA2T:
Movilidad del agujero $13 \text{ cm}^2/\text{Vs}$

Colaborador: Zhenan Bao (Stanford)

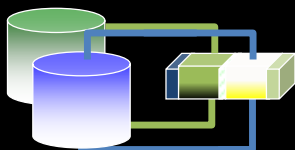
Nat. Comm. 2, 437 (2011)



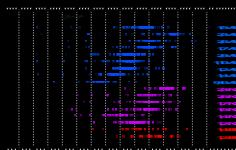
42

Baterías de Flujo Orgánicas

Colaboradores: Mike Aziz and Roy Gordon (Harvard)



Batería de flujo



Ciclo intenso de
diseño

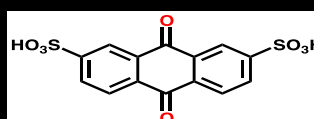


Moléculas sintetizadas
Prueba en baterías de flujo

Image source: Enervault



Selección computacional de
10,000 moléculas de quinonas



Molécula seleccionada

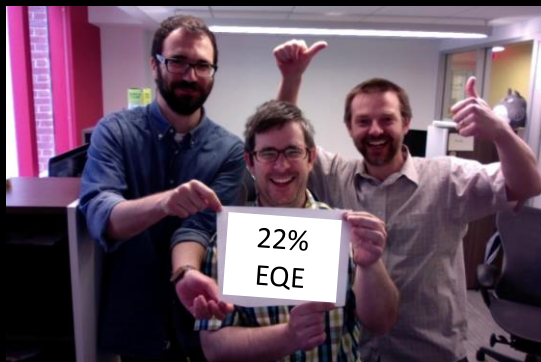
Chem. Sci., 6, 2015, p. 885

Nature, 505, 2014, p. 195

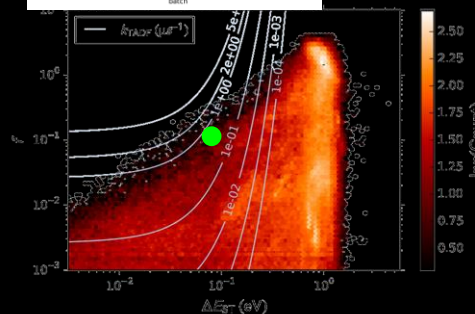
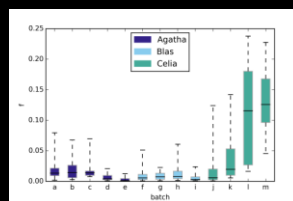


43

Búsqueda de Diodos Emisores de Luz Orgánicos de Alto Rendimiento

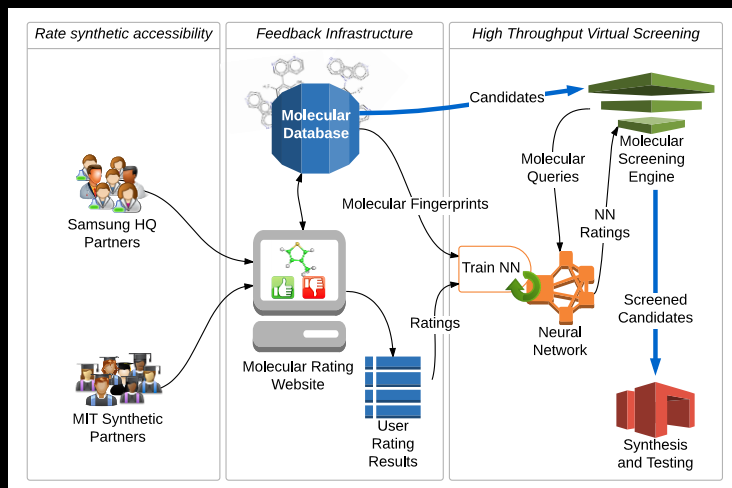


Colaboradores: Samsung IT Researchers, Ryan Adams (Harvard), Marc Baldo, Stephen Buchwald, Tim Swager, Troy Van Voorhis (MIT)



44

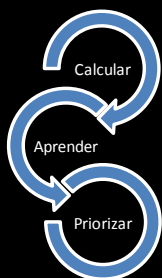
Flujo de Trabajo de la Red Neuronal de Entrenamiento



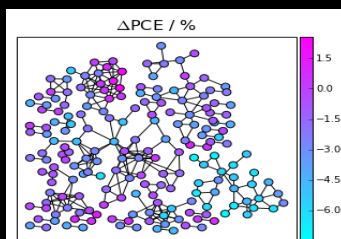
45

Proyecto de Energía Limpia Reloaded

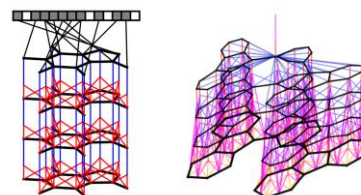
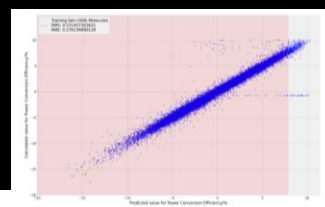
Machine learning



Bibliotecas fáciles de sintetizar



Calibración mediante procesos Gaussianos



Machine Learning:
Neural Fingerprints
(Colab. w Ryan Adams, Harvard)

E. O. Pyzer-Knapp, et al. Advanced Functional Materials (In Press) 2015



46

Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



“¿Qué método teórico es mejor para predecir propiedades de materiales orgánicos?”

- DFT B3LYP/6-31G*
- PM3
- Hartree Fock
- Todos dan lo mismo

47

Herramientas de redes, comunicación permanente con los colaboradores para el descubrimiento molecular exitoso

Estrategia y herramientas para el descubrimiento de materiales de gran alcance



Molecular Space Shuttle: plataforma avanzada para el descubrimiento molecular

48

¡Gracias!

Carlos Amador Bedolla <carlos.amador@unam.mx>

Alán Aspuru-Guzik <aspuru@chemistry.harvard.edu>

<http://aspuru.chem.harvard.edu>

49

Ideas que Queremos Que Recuerden:

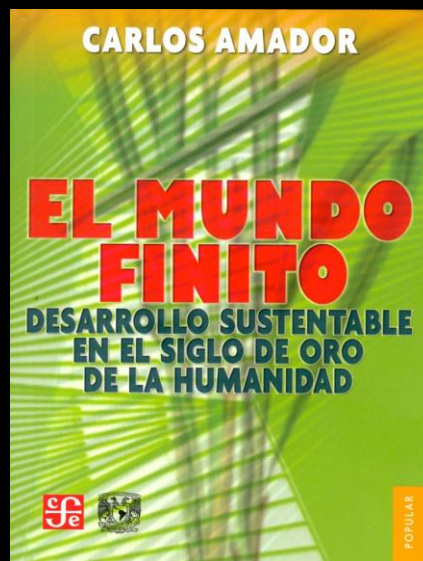
"La química computacional es una tecnología química madura con capacidad predictiva ---su realización requiere, todavía, artistas; pero cada vez la entendemos mejor y quizá acabaremos por automatizarla"

"Los sistemas de energía ---de dónde obtenemos la energía que necesitamos-- dependen tan importantemente de la generación como del almacenamiento de la energía"

"La permanencia del modo de vida moderno requiere de la ciencia en general y de la química en particular"

¿Qué más leer?

Un libro: Carlos Amador. "El mundo finito. Desarrollo sustentable en el siglo de oro de la humanidad"
FCE/UNAM (México 2014)



51

Artículos Científicos:

- Pyzer-Knapp et al. *Learning from the Harvard Clean Energy Project: The use of neural networks to accelerate materials discovery*. *Advanced Functional Materials* (2015). Just Accepted.
- Pyzer-Knapp et al. *What is High Throughput Virtual Screening? A Perspective from Organic Materials Discovery*. *Annual Reviews of Materials Science* 45 (2015): 196-216.
- Er et al. *Computational design of molecules for an all-quinone redox flow battery*. *Chemical Science* 6 (2015): 885-893.
- Hachmann et al. *Lead candidates for high-performance organic photovoltaics from high-throughput quantum chemistry – the Harvard Clean Energy Project*. *Energy & Environmental Science* 7, no. 2 (2014): 698-704.
- Olivares-Amaya et al. *Accelerated Computational Discovery of High-performance Materials for Organic Photovoltaics by Means of Cheminformatics*. *Energy & Environmental Science* 4, no. 12 (September 22, 2011): 4849

52



**“Panorama de la Química Computacional:
Los Químicos Teóricos Estudiarán Si Como Roncan Duermen”**



Carlos Amador Bedolla
Facultad de Química,
Universidad Nacional Autónoma
de México



Lena Ruiz Azuara
Presidente,
Sociedad Química de México



Alán Aspuru-Guzik
Profesor de Química y
Biología Química, la
Universidad de Harvard

Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/QuimicaComp>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society₅₄



Inscribirse para el ultimo ACS/SQM Webinar en Español



**“Panorama de la Iniciativa Empresarial:
Guía Para el Químico Emprendedor”**

18 de noviembre @ at 1pm CDT

Javier García Martínez, Co-fundador y Director Científico, Rive Technology, Inc.

Ingrid Montes, la Junta de Directores, American Chemical Society

www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/spanish/quimico-emprendedor



“Panorama de la Química Computacional: Los Químicos Teóricos Estudiarán Si Como Roncan Duermen”



Carlos Amador Bedolla
Facultad de Química,
Universidad Nacional Autónoma
de México

Lena Ruiz Azuara
Presidente,
Sociedad Química de México

Alán Aspuru-Guzik
Profesor de Química y
Biología Química, la
Universidad de Harvard

Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/QuimicaComp>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society₅₆



La Diversidad de la Audiencia



Hoy tenemos representantes de 17 países!



Sociedad Química de México



La Sociedad Química de México, A. C., es una Organización Nacional fundada el 16 de marzo de 1956 y constituida el 27 de agosto del mismo año, por un grupo de ilustres químicos encabezados por los Químicos Rafael Illescas Frisbie y José Ignacio Bolívar Goyanes, los Ingenieros Químicos Manuel Madrazo Garamendi, Guillermo Cortina Anciola, y la QFB, María del Consuelo Hidalgo Mondragón.

www.sqm.org.mx

58



La Oficina de Actividades Internacionales

American Chemical Society → Global Community → International Activities → Chapters

Global Community

International Activities

- Travel to the US
- Travel from the US
- Meetings & Activities
- INTI Exchange & Funding
- Global Alliances & Partnerships

Chapters

- Science & Human Rights
- Newsletter
- ACS International Center
- International Year of Chemistry 2011

International Chemical Sciences Chapters

ACS works to advance the field of chemistry around the world. Scientists outside the United States have formed International Chemical Sciences Chapters (ICSCs) to allow chemists within a geographic area to connect with one another, as well as ACS members around the world. Forming a chapter brings additional benefits to international members, beyond what they already enjoy as members of ACS.

Current Chapters:

- Hong Kong
- Hungary
- Malaysia
- Romania
- Saudi Arabia
- Shanghai
- South Africa
- South Korea
- Thailand

Establish a Chapter in Your Region

ACS encourages its international members to consider forming an ICSC as a means of staying connected with scientists in their region, and with the ACS membership around the world.

[Find out how to establish an International Chemical Sciences Chapter.](#)

ACS Network

Connect with peers around the world on the [ACS Network!](#)

Calendar of Events

[C&EN Calendar](#)

ACS in your language

[ACS in Chinese](#)

[ACS in Spanish](#)

Grants and Awards

International Chapters are eligible for a number of awards and grant opportunities issued by ACS. Find out more information about them here:

[Partners for Progress and Prosperity Award](#)

[Global Innovation Grant](#)

 **International Activities** www.acs.org/ic

59



Sugieran temas y expertos que les interesarían para el próximo webinar



acswebinars@acs.org

www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/spanish

60



Inscribirse para el ultimo ACS/SQM Webinar en Español



***“Panorama de la Iniciativa Empresarial:
Guía Para el Químico Emprendedor”***

18 de noviembre @ at 1pm CDT

Javier García Martínez, Co-fundador y Director Científico, Rive Technology, Inc.

Ingrid Montes, la Junta de Directores, American Chemical Society

www.acs.org/content/acs/en/acs-webinars/spanish/quimico-emprendedor

61