



BOLETIN DE PRENSA

Boletín número 4882

Ciudad Universitaria, 28 de septiembre de 2023

**Destaca investigadora de la UAEM utilidades
de la química teórica computacional**

Cercis Morera Boado, profesora investigadora del Centro de Investigaciones Químicas (CIQ) de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), aplica la Química Teórica Computacional para el diseño de detectores de sustancias en muy bajas concentraciones, como drogas diluidas en soluciones, hasta la identificación de mezclas de metales.

La investigadora informó que los dispositivos nanométricos o detectores de sustancias en muy bajas concentraciones, tienen un amplio rango de aplicación, desde detectar una única molécula, hasta la identificación de drogas en bajas concentraciones, moléculas tóxicas o pesticidas.

Cercis Morera detalló que los dispositivos nanométricos pueden aplicarse en la reparación e identificación de obras plásticas o pinturas antiguas, ya que detectan la originalidad de la obra con la identificación molecular de pigmentos, derivados de su composición química y concentración.

Otro de los proyectos de su investigación, se relaciona con cambiar las propiedades los materiales al someterlos a cambios de presión, temperaturas o magnitudes, para entender cómo cambian sus propiedades electrónicas, ejemplo de ello, es que se puede transformar un aislante en conductor o crear superconductores y sistemas aislantes.

"La Química Teórica es un área específica de la Química, que se dedica al estudio computacional para el diseño de modelos de reacciones, asociación, cálculo y diseño de estructuras moleculares, todo a través de una computadora, sin necesidad de laboratorios o experimentos", dijo.

La investigadora explicó que "entre los beneficios de los métodos matemáticos y computacionales de la Química Teórica, se encuentran el ahorro de tiempo y dinero, ya que pueden simular reacciones de reactivos, conocer los rendimientos de sustancias o hacer pruebas de fármacos para una determinada enfermedad, ahorrando a los químicos experimentalistas de laboratorio, los costos de producción e investigación".

Cercis Morera dijo que el área de la Química Teórica, "se encarga del estudio de las estructuras electrónicas con métodos precisos, conocidos como métodos Post Hartree Fock, que usa ecuaciones de Mecánica Cuántica para calcular la estructura de los materiales, de esta manera se puede obtener información e identificar reacciones muy cercanas a la validación, para orientar una experimentación con resultados más certeros", dijo.

"Otra de las aplicaciones que tiene, es simular la experimentación de materiales a bajas o altas temperaturas, lo que sería imposible en las condiciones de nuestro planeta, incluso, es posible simular las condiciones atmosféricas de otros planetas o el universo, desde las estructuras atómicas y moleculares", comentó.

Cercis Morera recordó que la ciencia es multidisciplinaria, por lo que se colabora con químicos experimentalistas, de instituciones como el Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), con la Universidad de Halifax Nova Scotia de Canadá, y con el Centro de Investigación en Ciencia y Tecnología Avanzada (Cicata), para el desarrollo de sistemas que puedan captar energías renovables.

Finalmente, Cercis Morera Boado dijo que en la UAEM se ofrece la licenciatura en Diseño Molecular y Nanoquímica, "con la cual existe una colaboración para generar sinergías entre la Química Experimental y la Química Teórica, en la búsqueda de entender, mejorar, reducir tiempos y costos de los procesos científicos", destacó.

Cabe destacar que Cercis Morera Boado cuenta con estudios de doctorado en Química por la Universidad de la Habana y en la Universidad Autónoma de Madrid; desde 2018 es profesora investigadora de Cátedra Conacyt en el CIQ donde se integró al cuerpo académico *Química Teórica y Física Molecular*, pertenece al Sistema Nacional de Investigadores (SNI) con Nivel 1 y a la Academia de Ciencias de Morelos, su línea de investigación se enfoca en la Química Teórica.

Por una humanidad culta

Av. Universidad 1001, Chamilpa, Cuernavaca, Morelos, México,

C.P. 62209, Tel. (01 777) 329 70 09.  @prensauaem  www.facebook.com/InformacionUAEM
<https://www.uaem.mx/difusion-y-medios/publicaciones/boletines>





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

RECTORÍA
DIRECCIÓN DE COMUNICACIÓN UNIVERSITARIA

Una universidad de excelencia

Av. Universidad 1001, Chamilpa, Cuernavaca, Morelos, México,
C.P. 62209, Tel. (01 777) 329 70 09.  @prensauaem  www.facebook.com/InformacionUAEM
<https://www.uaem.mx/difusion-y-medios/publicaciones/boletines>



Una universidad de excelencia

RECTORÍA
2017-2023