La Química Computacional en “Campus: Panel de Expert@s” en UniRadio Jaén

10/05/2021

La Química Computacional en “Campus: Panel de Expert@s” en UniRadio Jaén
Fuente
UniRadio Jaén / Sandra Morloz

Representantes del grupo de investigación “Estructura y Dinámica de Sistemas Químicos” intervinieron en el espacio de divulgación científica de la emisora universitaria

Dos de las responsables del **Grupo de Investigación “Estructura y Dinámica de Sistemas Químicos”** fueron las invitadas en el espacio dirigido por **Julio Ángel Olivares Merino**, concretamente **Amparo Navarro Rascón** y **Mari Paz Fernández-Lencrines**, ambas profesoras del Departamento de Química, Física y Analítica de la Universidad de Jaén.

Este grupo surgió en el año 2003 y está integrado por los cinco profesores que la constituyeron en su momento, cuatro de ellos docentes en el Campus de las Lagunillas y el otro, de la Politécnica de Linares. “Empezamos con líneas como la aplicación de compuestos orgánicos en el campo de la electrónica; la **biomedicina**, con el diseño de **fármacos**; la industria agroalimentaria y, dentro de la propia química, la interacción con otras ramas de la química”, argumentó Navarro Rascón.

El Grupo ha participado en eventos como **‘La Noche Europea de los Investigadores’**, en conferencias organizadas por la Universidad de Jaén, congresos nacionales e internacionales, al igual que en encuentros enfocados a la sociedad. Según Fernández-Lencrines “es una labor que se sigue desarrollando desde hace dos décadas, con talleres a nivel de laboratorio. Son prácticos, con participantes de distintas edades y ámbitos, colaborando en todo tipo de eventos que tienen relación con el mundo químico”. Se trata de una serie de proyectos de divulgación que se trasladan al público a fin de facilitar su entendimiento. Las dos invitadas coincidieron en que la investigación, la curiosidad e ilusión además de la vocación y los medios son fundamentales la larga trayectoria de un investigador.

Navarro declaró que a lo largo de estos años han publicado numerosos artículos científicos en revistas de alto impacto, como ***JCR***, publicaciones que, añadió, “para nosotros son algo fundamental, pues son trabajos interdisciplinares en los que cada grupo de investigación aporta una solución o interpretación de cada problema químico”. Se trata de trabajos referidos a polímeros, una sucesión de moléculas unidas normalmente por enlaces covalentes y que se repiten. Estos forman parte de los plásticos, los hidrogeles, materias flexibles y conductoras.

Ahora mismo existen varios proyectos en desarrollo relacionados con el nuevo diseño de emisores de luz que tienen propiedades luminiscentes, adecuadas para que puedan utilizarse en dispositivos electrónicos como los emisores LED. En este caso, subrayó Fernández-Lecrines, “tenemos idea de continuar con este tipo de compuestos, pero aplicados para el mundo de la biomedicina”. De hecho, colaboran en más líneas de investigación contando con distintas empresas y universidades. Entre tales ámbitos destacan: el agroalimentario, para el enriquecimiento y mejora de alimentos como la luteína en el aceite y la obtención de aditivos naturales para colorantes alimenticios, además del diseño de fármacos para **enfermedades**como el **Parkinson** y la propia

COVID-19.

Por otro lado, Navarro se refirió a algunos términos vinculados a sus ramas de estudio, en particular, la ‘química computacional’, la cual “consiste en hacer uso de métodos teóricos de la química física, que están implementados en programas de ordenador” y para cuyo trabajo el laboratorio es el propio ordenador. También señaló que este aspecto teórico es el que les permite interpretar cada función de la materia y predecir cuál será el comportamiento de esta. Es más, Navarro Rascón se refirió a las ‘técnicas espectroscópicas’ aquellas que dan la medida experimental de algunas propiedades y conducen, así, cálculos que hacen en grandes computadores. Además de estos conceptos, la experta puso énfasis en los compuestos orgánicos y plasmó una serie de ideas sobre la evolución de la luminiscencia en los productos ***OLED***, al tiempo que destacaba la importancia de esa /O/ relativa a lo **‘orgánico’** en las ventas actuales de dispositivos como televisores, teléfonos móviles, etcétera.

En síntesis, una oportunidad de conocer la labor tan minuciosa de un Grupo de Investigación cuyo trabajo va desde la industria alimentaria hasta la electrónica, sin obviar su línea de investigación vinculada a la biomedicina, que trata de combatir enfermedades varias.

La entrevista puede escucharse en el siguiente enlace: https://go.ivoox.com/rf/69781649

Química Computacional

Enlaces relacionados

- Podcast del programa