



GOBIERNO DE
MÉXICO



CONAHCYT
CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

Comunicado 511/2024
Ciudad de México, 12 de abril de 2024.

Conahcyt organiza coloquio sobre ciencia de frontera y su aplicación en tecnología química

- Resultados científicos de proyectos de ciencia de frontera Conahcyt muestran que la investigación novedosa puede devenir en ciencia aplicada
- Estudio de la estructura electrónica e inteligencia artificial química aborda la desulfuración del petróleo mexicano y la toxicología de los herbicidas
- Convocatoria Sinergias articula y suma capacidades, talento humano e infraestructura para el avance científico en diversos campos del conocimiento
- Conahcyt, en apego a la Ley General HCTI, rescata la ciencia básica y la ciencia de frontera en México, que fueron abandonadas en 2017 y 2018
- Las sesiones del Coloquio Sinergias continúan los días 16, 17 y 18 de abril

El Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (Conahcyt) presentó en sesión pública, en el marco del [coloquio “Sinergias: México en la frontera del conocimiento”](#), el trabajo interinstitucional, multidisciplinario y de ciencia de frontera del equipo que ejecuta el proyecto **Estructura electrónica e inteligencia artificial (AI) aplicada a problemas actuales de tecnología química en México**, en el que colabora más de una decena de personas investigadoras que pertenecen a cinco instituciones de educación superior (IES).

La convocatoria de Sinergias Conahcyt es una de las acciones estructurales que contribuyen al rescate del apoyo del Estado a la ciencia de frontera y básica, la cual se abandonó en 2017 y 2018, y que mandata la Ley General en materia de Humanidades, Ciencias, Tecnologías e Innovación (LGHCTI), para que nunca más se repita este abandono.

Sinergias establece una modalidad novedosa y vigente, orientada a proyectos que integran a grupos de trabajo numerosos con amplias capacidades de articulación que actualmente brindan resultados científicos rigurosos y éticos y, a su vez, muestran que la investigación de frontera trasciende los alcances confirmatorios de la ciencia.

Es importante ahondar que la ciencia de frontera se enfrenta a fenómenos no explorados, pero que resultan atractivos porque desafían intentos de explicación o proponen nuevas experiencias, con resultados poco previsibles, que incitan a su exploración. La ilusión en esta búsqueda recae en descubrir una nueva forma de ver a la naturaleza, que conlleve a extender los alcances de las ciencias.





GOBIERNO DE
MÉXICO



CONAHCYT
CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

Sinergias Conahcyt propicia el trabajo colaborativo mediante alianzas entre diferentes grupos que son parte de las IES más importantes del país y que, mediante diferentes disciplinas y enfoques aprovechan al máximo, y de manera muy eficiente, los recursos materiales, de talento humano e infraestructuras como la de cómputo para generar avances que realmente trasciendan las fronteras del conocimiento.

Conahcyt impulsa proyectos ambiciosos, articuladores y con amplias capacidades en diferentes disciplinas e instituciones que en el pasado estaban aislados y que, ahora, mediante los resultados que se han ido obteniendo, demuestran el compromiso del gobierno de México con el verdadero avance científico.

El coloquio Sinergias es un espacio para presentar al público interesado los resultados científicos de los proyectos de largo aliento que coordina Conahcyt, que integra a grandes grupos de investigación, que marcan diferencia significativa en la generación de conocimientos disruptivos, los cuales eventualmente permitirán tecnologías soberanas para la nación.

Las sesiones públicas dan visibilidad a cinco proyectos mexicanos de ciencia de frontera, en los que participan hasta 125 científicas y científicos que convergen en el ejercicio de una auténtica ciencia reflexiva, crítica, rigurosa, honesta y ética para profundizar en el entendimiento del mundo y el universo.

En apego a la LGHCTI, que establece la responsabilidad del Estado para apoyar a la ciencia básica y de frontera, el Conahcyt reúne a personas expertas en diversos campos temáticos para explicar en el coloquio Sinergias en qué consisten los proyectos que exploran nuevas fronteras del conocimiento.

La segunda sesión de este coloquio Sinergias abordó el proyecto **Estructura electrónica e inteligencia artificial (AI) aplicada a problemas actuales de tecnología química en México**, con el objetivo de discurrir en torno a estas técnicas que, en combinación con el cómputo de alto desempeño, resultan partes fundamentales de un número creciente y amplio de aplicaciones, que van desde la predicción de los hábitos de consumidores, hasta el reconocimiento de voz e imágenes, la predicción del tráfico en tiempo real o el diseño de compuestos químicos.

Estos métodos permiten identificar patrones en conjuntos de datos que pueden ser complejos debido a la naturaleza o la cantidad de los elementos. En la





**GOBIERNO DE
MÉXICO**



CONAHCYT
CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

actualidad, la combinación de las técnicas de IA con el poder predictivo de la mecánica cuántica abre nuevas vías para resolver problemas fundamentales en las ciencias químicas, resaltaron las personas especialistas.

En este proyecto también se busca combinar técnicas de IA con el cómputo de alto desempeño y la mecánica cuántica para abordar problemas de interés nacional, como la desulfuración del petróleo mexicano, la toxicología de los residuos de pesticidas, la formación de polimorfos de interés farmacéutico, la estructura y las propiedades de las sustancias amorfas para desarrollar dispositivos de almacenamiento y de sistemas magnéticos para el diseño de sensores químicos.

Con ello, explicaron las y los panelistas, se espera establecer protocolos que permitan predecir la estructura y propiedades de una amplia gama de sustancias como catalizadores, cristales moleculares, pesticidas, carbono y silicio amorfo y sistemas magnéticos, así como reportar hallazgos de este proyecto en al menos 18 artículos publicados en revistas internacionales indexadas.

El grupo que conforma este proyecto está integrado por 15 personas investigadoras, que pertenecen a cinco instituciones de educación superior: el Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (Cinvestav), la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo (UAEH), la Universidad Autónoma Metropolitana unidad Iztapalapa (UAM-I), la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y la Universidad Veracruzana (UV).

La sinergia inter y transdisciplinaria entre las instituciones que constituyen el grupo posibilita el desarrollo de trabajos exitosos en el campo de la teoría de los funcionales de la densidad, en cálculos de estructura electrónica utilizando técnicas de cómputo de alto desempeño y en AI.

Asimismo, a mediano plazo, pretende generar una red de cómputo de alto rendimiento coordinado por Conahcyt, que integre en un repositorio las capacidades de cómputo y muchas otras; la red estará al servicio del conjunto de la comunidad HCTI y de otras necesidades de desarrollo tecnológico, a partir de generar modelos y simulaciones en estos equipos.

El proyecto, argumentaron las personas especialistas, también abre la oportunidad de tener en México grupos potentes explorando la posibilidad de síntesis química de un compuesto que tenga actividad herbicida, y que no sea tóxico para el ser humano u otros animales.



GOBIERNO DE
MÉXICO



CONAHCYT

CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

Entre otras destacadas conclusiones, el proyecto *Estructura electrónica e inteligencia artificial aplicada a problemas actuales de tecnología química en México* logró mejorar la infraestructura de tres centros de supercómputo del Laboratorio Nacional de Cómputo de Alto Desempeño (Lancad).

Asimismo, fortaleció la colaboración interinstitucional, hecho que favoreció el crecimiento y formación de estudiantes de licenciatura, maestría, doctorado y posdoctorados en la materia.

Las y los panelistas concluyeron que la investigación de frontera se desarrolla a partir de metodologías disruptivas y propias. Añadieron que las sinergias son una vía para promover el avance de la investigación científica, de manera pertinente y encaminada a generar una soberanía tecnológica y contribuciones disruptivas.

Desde 2018, con el rescate de la ciencia básica y la ciencia de frontera en México, la investigación científica en diversos campos del conocimiento dio lugar a la publicación de una convocatoria desde el Conahcyt, que articula la colaboración y el trabajo corresponsable de diversos grupos de investigación, para dar paso a que las instituciones y personas investigadoras sumen capacidades en el avance científico, lo cual inspira la realización de este encuentro.

De esta manera, estos proyectos de ciencia de frontera buscan explorar distintas explicaciones a los fenómenos naturales y sociales que envuelven a la humanidad y que rebasan los límites de conocimiento actual, en búsqueda de teorías y disrupciones tecnológicas que brinden respuesta a las realidades.

El nuevo Conahcyt apoya prioritariamente la ciencia básica con énfasis en fomentar la ciencia de frontera; estimula la investigación científica con rigor y plena libertad, que da sustento a los programas de posgrado que se encargan de la formación de nuevas generaciones de profesionistas con pensamiento científico y crítico en todos los campos disciplinarios.

La sesión fue encabezada por la directora general del Conahcyt, María Elena Álvarez-Buylla Roces; y el profesor-investigador de la UAM-I y responsable técnico del proyecto, José Luis Gázquez Mateos.

Asimismo, asistieron de manera presencial la investigadora del Instituto de Química Aplicada de la UV, Myrna Hernández Matus; el investigador del Cinvestav, Alberto Vela Amieva; el investigador de la UAM-I, Joel Ireta Moreno; y el investigador la Facultad de Química de la UNAM, Fernando Cortés Guzmán. De forma virtual





**GOBIERNO DE
MÉXICO**



CONAHCYT
CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

participaron: el profesor-investigador de la UAEH, Julián Cruz Borbolla; y el investigador del Cinvestav unidad Mérida, Gabriel Merino Hernández.

Estructura electrónica e inteligencia artificial aplicada a problemas actuales de tecnología química en México

Este proyecto se compone de diversos ejes temáticos que, a lo largo de su periodo de implementación, ha logrado las siguientes contribuciones:

Estructura electrónica y reactividad química

Se desarrolló un método de estructura electrónica eficiente desde el punto de vista computacional. Predice propiedades con un nivel de precisión equivalente a la de métodos que son computacionalmente más demandantes. Asimismo, se formularon nuevos indicadores de reactividad química, que permiten correlacionar la reactividad global de sitios y de enlaces en una molécula con propiedades termodinámicas y cinéticas.

Desulfuración del petróleo mexicano

El uso de metodologías de IA permitió predicciones de selectividad y de conversión de dibenzotiofeno en comparación con los datos obtenidos de la bibliografía. Del mismo modo, se ha obtenido una gran cantidad de información relacionada con la reactividad de compuestos azufrados que permite la predicción de información de compuestos que no presenten datos experimentales.

Materiales amorfos

Se encontró que las redes neuronales ANI-1ccx y DeepMind21 predicen correctamente el ordenamiento conformacional en fase gaseosa de aminoácidos simples. Por otro lado, se observó que la combinación de CI-NEB con la red neuronal ANI-1ccx es capaz de describir los procesos de ensamblaje y desensamblaje molecular.

Polimorfismo

Se ha implementado con éxito un protocolo para generar estructuras cristalinas para una sustancia orgánica rígida o semiflexible y agruparlas por similitud estructural. Con este protocolo se logró identificar los dos polimorfos que presenta, experimentalmente, el ácido oxálico.



**GOBIERNO DE
MÉXICO**



CONAHCYT

CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

Cribado virtual y modelado molecular para identificar nuevos pesticidas

Se generó una base de datos con ligandos de ABP1 y TIR1, que permitió la creación de modelos clasificadores de posibles auxinas. De igual forma, se diseñó un conjunto de ligandos de afinidad considerable y se identificó un posible sitio alostérico dentro de la EPSPs y 4 estados metaestables que pueden explorarse para desarrollar nuevos inhibidores.

Se creó una base de datos de confórmers de EPSPs para realizar estudios basados en la estructura y/o cribado virtual.

Predicción de propiedades QTAIM mediante redes neuronales

Se creó una base de datos de propiedades QTAIM y se generaron modelos predictivos de reactividad basados en aprendizaje de máquina. También se llevó a cabo la predicción de parámetros de nucleofilia y electrofiliya mediante IA explicable. Además, se creó una base de datos de propiedades QTAIM/Reactividad y se empezó la creación de un modelo de clasificadores de nucleófilos y electrófilos.

Materiales magnéticos

Se encontró que tanto métodos fuertemente correlacionados como de funcionales de la densidad no son capaces de hacer predicciones correctas del entrecruzamiento de espín (SCO). Por otro lado, se observó que la IA actual es incapaz de predecir con amplitud el SCO. Sin embargo, la inclusión de contraiones es capaz de predecir la temperatura de transición de SCO.

Exploración del espacio químico

Se desarrollaron nuevas y eficientes metodologías para explorar la superficie de energía potencial de moléculas y sistemas cristalinos basados en restricciones químicas que permiten escribir las estructuras en cadenas ASCII, lo que permite emplear algoritmos utilizados en teoría de lenguaje.

La segunda sesión del coloquio “Sinergias: México en la frontera del conocimiento”, puede consultarse el siguiente enlace: <https://bit.ly/3VxSn7d>.

Se invita a seguir la transmisión de las próximas sesiones los días [16 de abril](#), [17 de abril](#) y [18 de abril](#).





GOBIERNO DE
MÉXICO



CONAHCYT
CONSEJO NACIONAL DE HUMANIDADES
CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS

-oo0oo-

**Coordinación de Comunicación
y Cooperación Internacional**

comunicacion@conahcyt.mx

conahcyt.mx

