

Propuesta de Proyecto para Laboratorio de Química

Título: Hacer tangible lo abstracto: Inteligencia Artificial para la enseñanza interactiva de la Reactividad Química.

¿De qué se trata el proyecto?

Enseñar conceptos como la "coordenada de reacción", la "direccionalidad" o las "interacciones intermoleculares" suele ser un gran desafío didáctico porque son ideas altamente abstractas. ¿Cómo podemos lograr que un estudiante logre "sentir" la barrera de activación al acercar dos moléculas o comprenda intuitivamente la importancia de la orientación espacial?. Para resolver este problema de enseñanza, estamos desarrollando un proyecto interdisciplinario (Química y Computación) que busca materializar estos conceptos a través de una herramienta virtual interactiva y lúdica. En este entorno 3D, los usuarios utilizan controles giroscópicos para manipular moléculas, debiendo orientarlas correctamente para lograr que reaccionen, mientras visualizan los cambios de energía en tiempo real.

El desafío computacional (Tu rol en el proyecto):

Para que esta experiencia educativa sea fluida e interactiva, la energía no puede calcularse mediante métodos cuánticos tradicionales en el momento, ya que son muy lentos. Aquí es donde entra el objetivo de este trabajo de Laboratorio: **buscamos entrenar un campo de fuerza basado en Machine Learning (Redes Neuronales) capaz de predecir la energía y las fuerzas de la reacción al instante.**

¿Qué se va a hacer en este Laboratorio?

Se hará enfoque en el "cerebro químico" del juego. Trabajaremos con dos reacciones paradigmáticas y de gran interés didáctico por ser concertadas (no radicalarias):

1. **Diels-Alder:** La clásica cicloadición entre un dieno y un dienófilo.
2. **Reacción Click (SPAAC):** La cicloadición entre una azida y un ciclooctino tensionado (Premio Nobel 2022).

Tareas

- Realizar simulaciones mecanocuánticas (DFT) usando el programa **ORCA** para mapear el camino de estas reacciones utilizando el método NEB (Nudged Elastic Band).
- Procesar estos datos usando **Python** para crear un set de entrenamiento.
- Entrenar arquitecturas de Redes Neuronales de última generación (como **ANI** o **MACE**) evaluando el compromiso entre precisión química y velocidad de cálculo (crucial para un videojuego).
- Probar tu red neuronal corriendo una Dinámica Molecular donde la reacción ocurra espontáneamente.

¿Qué se va a aprender?

Se aprenderán herramientas de altísima demanda en la investigación y la industria actual: simulación de estructura electrónica (DFT), programación en Python, análisis de datos y entrenamiento de modelos de Machine Learning (IA) aplicados a la química. Todo esto en contribución para crear una herramienta educativa.

Requisitos: Ganas de aprender computación (no hace falta ser experto previo, pero sí tener interés en programar en Python) y entusiasmo por la fisicoquímica orgánica y la didáctica.

Contacto: Si estás interesado puedes comunicarte con Matias Factorovich, matiasf86@gmail.com. O acercate al laboratorio de modelado molecular, primer piso DQIAQF laboratorio E1