

4.4 Influencia de la IA en el desarrollo de la Química.

Influencia de la IA en el desarrollo de la Química.

En química, pasamos de la física de las partículas individuales al estudio de los **sistemas moleculares**. La química es el nivel donde emergen propiedades nuevas (como la acidez, la toxicidad o la capacidad catalítica) que no existen en los átomos aislados.

La IA ha impulsado la transformación, ya en marcha desde hace décadas, hacia una **química predictiva y generativa**, permitiéndonos navegar por el "espacio químico" (el conjunto de todas las moléculas posibles), que es vasto y casi infinito.

Históricamente, descubrir un nuevo material o fármaco tomaba en torno a unos 10-15 años y tenía un costo de miles de millones de euros. La IA está reduciendo estos tiempos de forma drástica al predecir cómo reaccionarán las moléculas antes siquiera de mezclarlas en un tubo de ensayo. No elimina las fases de los ensayos pero sí permite explorar diferentes posibilidades y podar algunas poco esperanzadoras.

El Descubrimiento de Nuevos Antibióticos: El caso de la *Halicina*

Uno de los mayores retos de la medicina actual es la resistencia a los antibióticos. En 2020, investigadores del MIT utilizaron un modelo de aprendizaje profundo para analizar más de 100 millones de compuestos químicos en pocos días.

La IA identificó una molécula, a la que llamaron **Halicina** (en honor a la IA *HAL 9000*), que tiene una estructura química muy distinta a cualquier antibiótico conocido. Lo más impresionante es que la Halicina resultó ser eficaz contra bacterias que ya eran resistentes a todos los fármacos convencionales.

Eficiencia en el cribado de compuestos para antibióticos

Método de Investigación	Compuestos analizados	Tiempo requerido	Resultado
Cribado Experimental Humano	~varios miles	Meses / Años	Éxito limitado por coste

Método de Investigación	Compuestos analizados	Tiempo requerido	Resultado
Cribado por IA (Deep Learning)	>100 millones	4 días	Descubrimiento de Halicina

Fuente: [Stokes, J. M., et al. \(2020\). Cell.](#)

Química Sostenible.

Uno de los campos de aplicación más prometedores es la búsqueda de compuestos y materiales que permitan una mejora de nuestra gestión de los problemas medioambientales. Veamos algunos ejemplos.

El Fin de los Plásticos Eternos: La enzima "FAST-PETase".

El polietileno tereftalato (PET) es el plástico de las botellas que tarda siglos en degradarse. En 2022, investigadores de la Universidad de Texas en Austin utilizaron un modelo de IA para diseñar una enzima capaz de degradar algunos plásticos en cuestión de horas o días, incluso a temperaturas bajas.

La IA analizó miles de variaciones posibles en la estructura de una enzima natural (la *PETasa*) para encontrar la configuración más estable y eficiente. El resultado, bautizado como **FAST-PETase**, puede descomponer plásticos post-consumo en sus componentes químicos originales (monómeros), permitiendo un reciclaje infinito y perfecto.

Eficiencia de degradación de PET (IA vs. Métodos Naturales).

Sistema de Degradación	Tiempo de degradación	Temperatura necesaria	Eficiencia de despolimerización
Bacterias naturales (<i>I. sakaiensis</i>)	Semanas / Meses	~30°C	Muy baja
Enzimas de ingeniería previa	Días	>70°C	Moderada (poca estabilidad)
FAST-PETase (Diseñada por IA)	24 a 48 horas	<50°C	90% - 100%

Fuente: [Lu, H., et al. \(2022\). Nature.](#)

Captura de Carbono con Redes Metal-Orgánicas (MOFs).

Para frenar el cambio climático, no basta con dejar de emitir CO₂, necesitamos eliminarlo de la atmósfera capturándolo. Sin embargo, los filtros actuales son caros y consumen mucha energía.

Aquí entra la IA para diseñar **MOFs (Metal-Organic Frameworks)**: estructuras cristalinas ultra-porosas que actúan como "esponjas" moleculares. Un solo gramo de un MOF bien diseñado puede tener una superficie interna enorme.

“ The Rise of Generative AI for Metal-Organic Framework Design and Synthesis

1. This perspective article explores how generative artificial intelligence (GenAI) is transforming the design and discovery of metal-organic frameworks (MOFs), shifting from laborious enumeration to... pic.twitter.com/rC8F9vpbuj

— Biology+AI Daily (@BiologyAIDaily) [August 20, 2025](#)

Sustitución de disolventes Tóxicos

Muchos procesos químicos industriales requieren disolventes que son inflamables o cancerígenos. La IA está ayudando a diseñar **Eutécticos Profundos (DES)** y líquidos iónicos: "solventes a medida" que son biodegradables y no tóxicos.

Mediante el uso de modelos predictivos de aprendizaje automático (Machine Learning), los químicos pueden predecir la toxicidad y el punto de fusión de mezclas químicas antes de fabricarlas, asegurando que el proceso industrial sea seguro para los trabajadores y el medio ambiente.

Predicción de Estructuras: Más allá de AlphaFold

Aunque AlphaFold es famoso por las proteínas (biología), su base es puramente química: predecir la posición de los átomos en el espacio basándose en sus interacciones electroquímicas. Esta misma lógica se está aplicando es la que se ha empleado para predecir la estructura de **redes metal-orgánicas (MOFs)**, que son materiales "esponja" capaces de almacenar hidrógeno o filtrar agua contaminada, pero puede servir para cualquier otra molécula, se ha simplificado mucho los cálculos de geometría molecular a partir de la molécula y sus enlaces.

Para saber más: Puedes seguir esta [cuenta de X](#) que informa de noticias relacionadas con biología e IA

Revision #2

Created 2026-03-23 09:20:03 CET by Chefo Cariñena

Updated 2026-03-23 09:52:17 CET by Chefo Cariñena