

Carta del editor

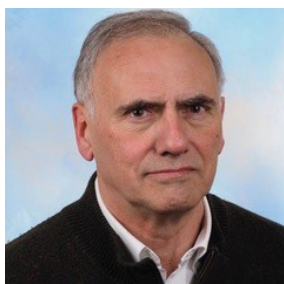
Juan Á. Casares

El número de diciembre de Anales recoge cada año la noticia de la concesión de los Premios Nobel de Química. En esta ocasión los premiados son David Baker (USA) (50%) "for computational protein design", y Demis Hassabis (UK) (25%) y John Jumper (UK) (25%) "for protein structure prediction". El diseño computacional de proteínas y la consiguiente síntesis de proteínas artificiales está ya proporcionando nuevos materiales y nuevos enzimas. La predicción de estructuras de proteínas mediante inteligencia artificial ha cambiado de un plumazo, y de forma un tanto inesperada, la forma de hacer investigación en bioquímica y el papel de los científicos que se dedican a eso, a determinar estructuras de proteínas por distintos medios. Pero las decisiones de la Real Academia Sueca de Ciencias tienen más importancia que la mera distribución de galardones (y dinero) a investigadores, por el simple hecho de que todos estamos pendientes de su decisión y escuchamos con atención el resultado. La Academia Sueca ha dicho alto y claro que la inteligencia artificial ha llegado a la Química para quedarse, y que el uso de computación no sólo nos permite entender los fenómenos químicos, también lleva la investigación a otros territorios. Y todo el mundo lo ha oído.

El uso de la computación avanzada y la inteligencia artificial (en adelante IA) en investigación se está imponiendo por la vía de los hechos. La investigación en química es un campo extremadamente competitivo y las herramientas que dan ventaja competitiva sacan de ese campo a quienes no las utilizan, por lo que no necesitan especial promoción. El uso potencial de la IA va más allá de la interpretación de datos experimentales complejos, alcanza toda la actividad científica, desde el diseño de experimentos a la redacción de publicaciones, y desde luego a la creación de las figuras que se incluyen en las publicaciones. Esto es muy importante porque las figuras de las publicaciones son el resumen gráfico de los datos experimentales y la expresión simbólica de conceptos abstractos. Otro asunto diferente es el uso de la IA con fines de ilustración gráfica. Habrá situaciones en las que la ilustración cree una impresión falsa de la realidad, y otras en las que cumpla una función meramente estética.

El uso de la IA en investigación plantea una serie de cuestiones éticas en las que deberíamos pensar, empezando por decidir si es correcto utilizar imágenes falsas para describir fenómenos de los que intentamos interpretar su causa química

Otro aspecto importante del desarrollo de la IA es su uso en docencia (a la que la mayor parte de nosotros dedicamos algún tiempo al cabo del año). En este sentido, la situación actual me retrotrae a mi adolescencia. Recuerdo el uso de las tablas de logaritmos, la búsqueda de la mantisa y la característica para alcanzar el valor buscado con cuatro o cinco cifras significati-



Juan Á. Casares.

vas. También recuerdo los acalorados debates acerca de si se debía permitir a los alumnos el uso de calculadoras portátiles para resolver los problemas de física o de química. Estamos viviendo una situación que dará lugar a cambios de contenidos y de enfoques mucho más profundos que aquellos y, sorprendentemente, se habla muy poco de ello. Parece como si la única preocupación de los docentes fuera evitar que los alumnos usen la IA para completar sus trabajos. Sin embargo, ya hay excelentes programas capaces de resolver muchos de los problemas semejantes a los que enseñamos

a resolver a nuestros alumnos, desde determinar estructuras moleculares a partir de datos espectroscópicos hasta diseñar rutas de síntesis de compuestos moderadamente complejos. A medida que la inteligencia artificial alcance distintas zonas de nuestra competencia más tareas podrán ser encomendadas a las máquinas, dejando obsoletos algunos contenidos de nuestros temarios. Por otra parte, el disponer de herramientas computacionales predictivas ha de cambiar nuestra forma de enseñar los contenidos conceptuales. Tendremos a nuestro alcance ejemplos más claros, podremos componer ejercicios más formativos y también los alumnos tendrán a mano herramientas con las que cuestionar y desafiar las enseñanzas de sus profesores.

Deberíamos hablar de esto. Anales es el lugar adecuado para establecer esa discusión y mantenerla abierta, para intercambiar ideas con pausa y reflexión y para buscar compañeros de discusión con criterio y experiencia. Todos estamos invitados, esperamos vuestras contribuciones en forma de artículos científicos, ensayos, artículos de docencia o cartas al director, vuestras experiencias y opiniones son bienvenidas y son necesarias.

En este número contamos con dos artículos de investigación. Uno de ellos sobre un tema de creciente actualidad: la reducción electroquímica del CO₂, el otro sobre un tipo de complejos con ligandos poco usuales que se han revelado extraordinariamente eficientes en algunos procesos catalíticos. En la sección "Enseñanza de la Química" incluimos artículos relativos a plantas luminiscentes, un experimento sencillo y advertencias para su correcta interpretación, y un muy interesante artículo acerca de cómo operan las mascarillas de oxígeno de emergencia. La portada es una adaptación de la representación esquemática del átomo de Bohr-Sommerfeld, relacionada con el siempre interesante artículo de Santiago Álvarez en "Imágenes de la Química".

Finalmente, y en otro orden de cosas, aprovecho esta carta para anunciar la incorporación, a partir del número 1 de 2025, de Bibiana Campos Seijo como Editora Ejecutiva de Anales. Sin duda su experiencia en el campo editorial de sociedades científicas nos ayudará a hacer de Anales de Química de la RSEQ una revista mejor. Sea bienvenida.