

SINTESI ORGANIKOAREN IKERKUNTZA ORDENADORE BIDEZ

Jose Mari Sarasola

Sintesi kimikoa honela defini daiteke: beste produktu batzuetatik abiatuz erreazio-sekuentzia baten ondorioz zenbait produktu lortzea.

Erreakzio-sekuentzia hau lortzeko zenbait lege kontuan izan behar dugu. Lege hauek, momentu edo egoera konkretu batean erreazio bat aplikagarria den ala ez esaten digute.

Baina beste zenbait gauza ere ezagutu behar dugu sintesibide egokiena aukeratzeko:

- Erreakzio-sekuentziaren pauso bakoitzaren etekina.
- Erabili behar ditugun erreaktiboaren prezioa.
- Sintesibidearen pauso-kopurua minimoa izatea, produktuaren prezioa minimoa izan dadin.

- Bidean gerta daitezkeen erreazio lehiakideen azterketa. Erreakzio hauek eragina izango dute bai etekinean eta bai produktuaren prezioan. Kontuan izan erreazio lehiakideak direla eta produktua ez dela oso garbia izango. Beraz garbitu egin behar da eta honek prezioa igo egingo du.

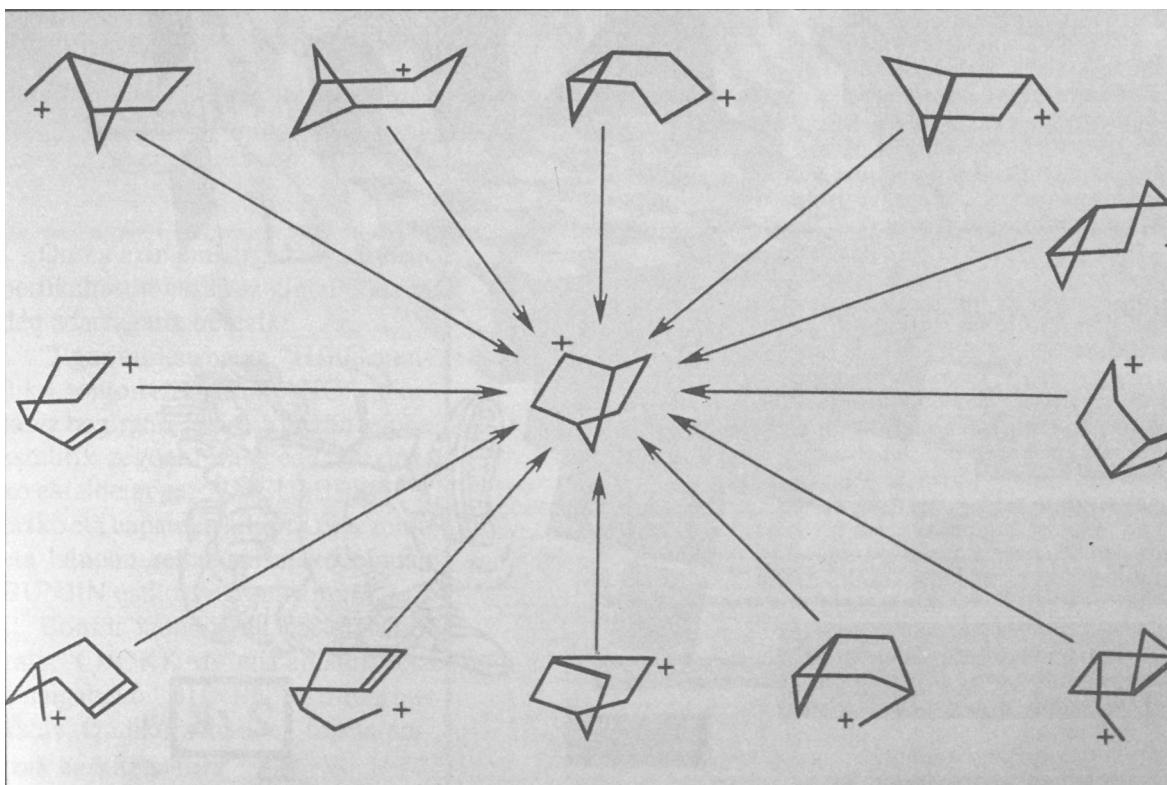
Espezie kimiko eta erreazio ezberdin asko ditugunez, produktu bat lortzeko aukera anitz izango dugu. Industrian biderik merkeena eta burutzen errazena aukeratu behar dugu. Bide hori zein den jakiteko gauza hauek kontuan izan behar ditugu: ditugun gailu-motak eta erreaktore-motak, horiek erabiltzea erraza ala zaila den eta produktu kimikoen merkaturuan erreaktiboak zein prezioan dauden.

Beraz sintesia egiteko orduan batetik

datu-kopuru handia eduki behar dugu kontutan eta bestetik aukera ezberdin anitzetatik egokiena hartu behar dugu. Honek bi arazo dakartza:

- Denbora: biderik egokiena aukeratzeko denbora asko behar dugu.
- Erroreak: gizakiak errore-posibilitatea berezkoa duenez, hau handiagotu egiten da datu askorekin lan egite-rakoan.

Horregatik hirurogeigarreneko hamarkadan ordenadoreak erabiltzen hasi ziren. Hasieran ikerlarien artean eztabaida sortu zen. Batzuek ziotenez, kimika formalizazio-neurri baxuko zientzia zen eta benetan garrantzia zuena ikerlariaren intuizioa zen. Aldiz beste ikerlari batzuek ziotenez, kimikari baten lan intelektualean ordenadoreak laguntzeko



*FLAMINGO
programaren
bidez lortutako
egitura kimiko
konplexuak*

gai ziren eta lagundu egin behar zuen.

Ordenadore batek aukera ezberdinen azterketa hobeto eta azkarrago egin dezake. Ikerlariak egin behar duena, ordenadoreari lana planteatzea da. Horretarako hizkuntza egokia erabili beharko du; ikur matematikoetan oinarritutako hizkuntza. Azken honetan datza zailtasunik handiena; kimikako ezagumendu guztiak hizkuntza matematikora itzultzean alegia.

Ordenadore batek bi modutara lagun diezaiokete kimikariari:

1. Datuen gordeleku gisa. Kimikako ezagumenduak eta aurreko esperientzia guztiak jasotzen ditu eta edozein unetan eskura izan ditzakegu. Hauek ez dira gauza berriak asmatzeko gai.
2. Produktu baten sintesirako aldagai logiko ezberdinen azterketaz arduratuz. Hauek kimika organikoko erreakzio berriak aurkitzeko gai dira.

Kimika organikoan lehenengo sistema aditua, hau da, lehenengo adimen artifiziala, DENDRAL izenekoa izan zen. E. Feigenbaur eta J. Lederberg-ek burutua izan zen. DENDRAL, analisi espektroskopikoen emaitzetan oinarrituz, molekula organikoen egitura tridimentsionala lortzeko gai zen.

70.eko hamarkadako beste sistema batzuk hauek dira: LHASA, SECS, SYNCHEM eta PASCOP adibidez. Hauek zenbait datutan oinarrituz aukera ezberdinak aurkezten zituzten eta kimikariak aukeratzen zuen zein bidetatik jarraitu.

Ordenadorez lagunduriko sintesi organikorako beste saio bat FLAMINGO programa zen. Programa honekin "M. Lomonosov" Moskuko Unibertsitatean 1972. urtean hasi ziren lanean. Programa honek honela egiten du lana:

Ordenadorea egitura batean oinarritzen da eta egitura hori hasierako espezie

kimikoarena da. Kimika organikoko erreakzioak lotura ezberdinen permutazioak direla kontsideratzen da, hau da, loturak apurtu egiten dira toki batzuetan eta osatu beste batzuetan. Permutazio posibleak asko direnez gero, zenbait muga edo kriterio jartzen zaizkio. Hauei esker ordenadoreak azterketa bat egiten du; eta horrela ez du lortzen ez egitura irrealik eta ez bikoizketarik, hau da, espezie berdinek. Beste modu batera esanda, bilaketa-banda estutu egiten du eta ez ditu onartzen kimikoki garrantzitsuak ez diren emaitzak, nahiz eta matematikoki zuzenak izan.

Bestalde ikerlariak bere ezagumenduei esker zenbait muga berezi sar ditzake programan. Adibidez, konposatu batek dituen atomo guztietatik batzuk bakarrik aukeratzea. Horrela atomo hauen loturek bakarrik parte hartuko dute permutazioan.

Sartzen dugun informazioa eta emaitzak grafikoki irudikatzen dizkigu ordenadoreak.

Bere lanerako behar duen denbora hiru eta bost segundo bitartekoa da.

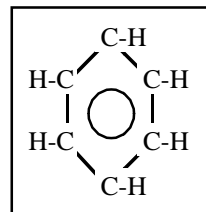
Kimikariak lortzen diren emaitzetatik egokienak aukeratzen ditu, hauek ordenadorearen memorian gordetzen dira eta gero erabiliak izan daitezke hasierako espezie gisa. Horrela etapa anitzetako sintesi bat egin daiteke.

Honelako beste esperientzia bat, UAM-IBM eta Sarria kimika-institutuaren proiektua izan da. Proiektu hau 1986. urtean hasi zen eta ikasleei zuzendutakoa zen.

Proiektu honen ezaugarri nagusia, hizkuntza informatikoa oso erraza edukitzea zen. Nahiz eta informatikaezagumendu handirik ez izan, sistema honekin lana egitea posible zen.

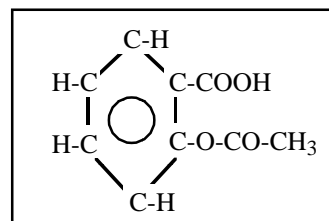
Hasiera batean kimika organikoko espezie kimikoen multzo bat hartu zuten. Multzo hau bentzenoaz eta bentzenotik eratorritako espeziez osatzen zen. Ben-

tzenoak egitura hexagonala du eta bere erpin bakoitzean karbono-atomo bat du. Karbono honi lotura bat aske geratzen zaio eta substantzia honetan hidrogeno-atomo batekin lotuta dago. Bentzenotik eratorritako molekulak hidrogeno-atomoa beste atomo batez, erradikal batez edo atomo-multzo batez ordezkatzuz lortzen dira. Adibidez azido azetilsaliziliko (aspirina) hidrogeno bat COOH erradikal batez eta beste bat O-CO-CH₃ batez ordezkatzuz lortzen da.



Bentzenoaren formula kimikoa

Produktu bat lortzeko, ondorengo informazioa eman behar diote sistemari:

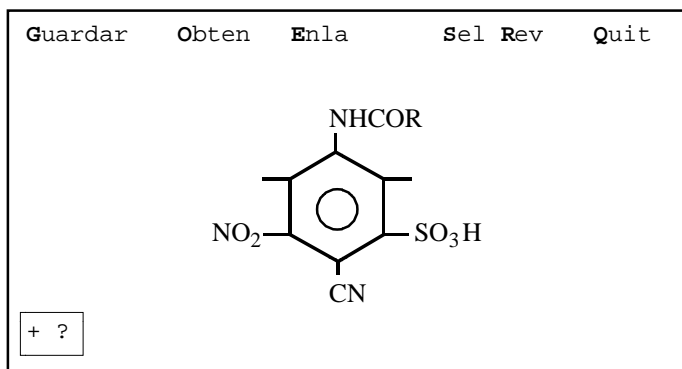


Azido azetilsalizikoaren (aspirinaren) formula kimikoa

- Oinarrizko produktuen eta beren prezioen zerrenda.
- Erreakzio-mota guztien zerrenda. Hemen definitu behar zaizkio zein erradikalek parte hartzen duten, erreakzioaren etekina eta mol bakoitzeko kostua.
- Murrizketen eta arauen multzo bat. Honetaz baliatuko da une guztietan erreakzio bat aplikatu daitekeen ala ez erabakitzeko.

Informazio hau jaso ondoren, sistema honek produktu bat lortzeko sintesibiderik merkeena zein den esango digu.

Sistema honen arazorik handiena izugarritzko aukera-kopurua erabiltzea eta erabakia hartzeko denbora asko behar izatea da. Denbora hau zerbait murrizteko sistemari memoria bat jarri zaio, hau da, gogoratzeko ahalmena eman zaio. Erdibideko produktuen informazioa gordetzen du eta horrela sintesibide bat produktu horretatik pasatzen bada, erabakia hartzeko behar duen denbora txikiagoa izango da. ■



Ordenadore-pantailaren itxura, bentzenoak lau erradikal ordezkaturik ditueneko egitura garatzen ari denean