

¿Por qué hay que hablar de mujeres en Química Computacional y no solo de Química Computacional?

Fernanda I. Saldívar-González*, Ana L. Chávez-Hernández*

ORCID: 0000-0002-0435-8662

ORCID: 0000-0002-6202-1769

Diana L. Prado-Romero*, Mariana González-Medina**

ORCID: 0000-0001-8918-6451

ORCID: 0000-0001-7365-939X

<https://doi.org/10.29105/cienciauanl26.121-1>

* Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México.

** Instituto Pasteur, París, Francia.

Contacto: fer.saldivarg@gmail.com



Cuando se habla de Química, lo más común es imaginar a alguien dentro de un laboratorio, portando *goggles*, vistiendo una bata y trabajando con matraces (el llamado “laboratorio húmedo” o *wet lab*). Sin embargo, también existen hombres y mujeres que están detrás de una computadora haciendo experimentos, pero con algoritmos (el llamado “laboratorio seco” o *dry lab*). La Química Computacional es una disciplina que se nutre en gran medida de datos experimentales generados en un laboratorio húmedo. La idea de usar computadoras es transformar estos datos químicos (llámense reacciones químicas, compuestos químicos, datos de actividad biológica, etc.) en información y ésta en conocimiento, lo cual permite reducir costos y eficientar procesos. Por esa razón ha tenido un gran impacto en la sociedad y cada vez hay un mayor número de aplicaciones que se ven reflejadas en un incremento de artículos y publicaciones científicas (Damm-Ganamet *et al.*, 2020).

Pero, ¿por qué es necesario enfatizar la labor que han hecho las mujeres en la Química Computacional y no sólo hablar de esta disciplina? La baja representación de mujeres en espacios STEM (del inglés ciencia, tecnología, ingeniería y Matemáticas) es un problema multifactorial que no sólo afecta a nivel social, sino que también repercute en la forma en la que se hace y se piensa la ciencia. De acuerdo con el Instituto de Estadística de la UNESCO, menos de 30% de los investigadores de STEM en todo el mundo son mujeres (Emambokus *et al.*, 2016). El hecho de que las niñas y mujeres no se sientan capaces en ciertas áreas, o incluso ni las consideren a la hora de elegir carrera, es una situación que requiere nuestra atención. Resaltar las contribuciones de mujeres en la Química Computacional y discutir tanto los factores que han influido en la participación de mujeres en ella, como los factores que siguen obstaculizando su éxito en todos los niveles, nos permite identificar los retos, las oportunidades y las áreas de desarrollo que tienen actualmente las mujeres que quieren orientar su carrera profesional hacia allá. También

es importante dar difusión a este tema para avanzar en la construcción de una ciencia con perspectiva de género en la que las aplicaciones científicas beneficien a una mayor parte de la sociedad.

¿QUÉ ES LA QUÍMICA COMPUTACIONAL Y QUÉ APLICACIONES TIENE?

Existen tantas definiciones de Química Computacional que pueden llegar a ser confusas, debido a que, por mucho tiempo, el término fue usado para describir lo que ahora representa la Química Teórica. Otras definiciones se enfocan demasiado en los métodos utilizados, excluyendo campos como la Quimioinformática. Para usos prácticos, y para dar una visión más amplia de lo que representan los métodos computacionales en Química, utilizaremos la definición del Dr. Gabriel Cuevas, quien la menciona como una disciplina que comprende todos aquellos aspectos de la investigación en Química que se benefician de la aplicación de las computadoras (Cuevas, 2005). La figura 1 resume algunas áreas que comprende y sus principales aplicaciones. Como podemos ver, aborda cuestionamientos desde el nivel electrónico y atómico hasta el nivel macroescala. Por ejemplo, en la Química Teórica, los métodos computacionales se usan en la validación de métodos químico-cuánticos, para el cálculo de estructuras tridimensionales, y también para predecir o explicar la estructura y reactividad de las moléculas (Lu, Deng y Shuai, 2021).

En el descubrimiento y desarrollo de fármacos, los métodos computacionales (tanto derivados de la Quimioinformática como de la Bioinformática) han tenido un impacto sustancial en la identificación y el diseño de nuevos compuestos, además de la elucidación de mecanismos de acción de fármacos (Saldívar-González, Prieto-Martínez y Me-



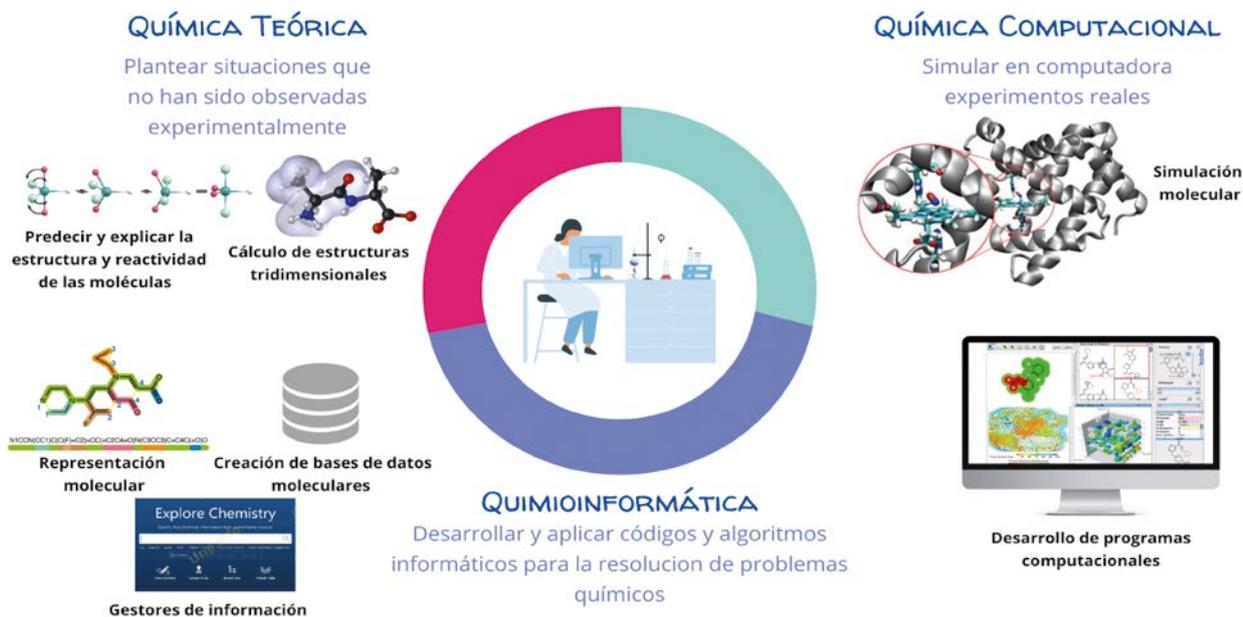


Figura 1. Áreas de la Química Computacional y sus principales aplicaciones.

dina-Franco, 2017). A nivel industrial, la Química Computacional se usa para caracterizar y diseñar nuevos materiales, así como en el desarrollo de rutas de síntesis química más eficientes a través de herramientas de inteligencia artificial (IA) (Lu, Deng y Shuai, 2021).

¿QUÉ PAPEL JUEGAN LAS MUJERES EN LA QUÍMICA COMPUTACIONAL?

Históricamente, las mujeres han tenido una presencia muy activa en sectores como la informática y las telecomunicaciones. En la década de los sesenta, las mujeres constituían la mayor parte de la fuerza laboral informática. Sin embargo, esto cambió con la aparición de las computadoras de escritorio, que popularizaron esta actividad como algo exclusivo para hombres. Tan sólo en EUA, el número de mujeres graduadas en informática pasó de 37% en 1984 a 18% en 2017 (White, 2017). Esta disparidad entre hombres y mujeres es aún más grande conforme va aumentando el nivel educativo. A pesar de las barreras de su época, mujeres como las doctoras Margaret Dayhoff, Yvonne Martin y Arianna Wright Rosenbluth, lograron posicionarse dentro del círculo compu-

tacional, abriendo camino para la aplicación de la computación en áreas de la ciencia como Biología y Química. La Dra. Dayhoff sentó las bases de la Bioinformática (Gauthier *et al.*, 2019), mientras que la Dra. Martin fue una de las primeras defensoras de la Química Computacional y su uso en el diseño de fármacos (Stouch, 2009). Por su parte, la Dra. Wright Rosenbluth ayudó a crear Metrópolis, uno de los algoritmos más importantes que se usa en modelado molecular.

Afortunadamente, el panorama actual en la Biología y la Química Computacional es mejor que en los sectores exclusivamente computacionales. En los últimos 40 años, el número de afiliaciones y la presencia de mujeres en congresos en esta división y en diseño de fármacos asistido por computadora (DIFAC) ha aumentado a 25% (Holloway y McGaughey, 2018). En particular, en el DIFAC se estima que esta cifra ha aumentado a 38% (hasta 2017), comparado con 13% en 1989 y 1% en 1975. Esto se debe en gran parte a que son divisiones relativamente nuevas, además de la disminución de limitaciones por normas sociales obsoletas respecto a roles de género. También, la naturaleza multidisciplinaria, en donde convergen egresados de carreras como Química, Biología, Bioquímica, Farmacia e incluso algunas ingenierías, ha disminuido esta brecha. Otros factores que contribuyen a un crecimiento del número de mujeres son la mayor flexibilidad que permite el trabajo vía remota y las mentorías positivas. Estas últimas pueden proporcionar perspectivas importantes en el área de trabajo, estilos de vida y valores reflejados.

Recientemente, las revistas científicas han tomado iniciativas para reconocer y celebrar el trabajo de mujeres en la Química Computacional y han organizado conversatorios y volúmenes o colecciones especiales (ver en línea: *Women in Computational Chemistry* y *Women in Artificial Intelligence in the Life Sciences*), que exponen investigaciones, cifras, opiniones y experiencias

personales de mujeres en esa especialidad. Entre los retos que aún quedan por afrontar se recalcan: obstáculos culturales y sociales (mayoritariamente en mujeres de primera generación), sexismo, malas políticas de licencia de maternidad/paternidad, discrepancias salariales y el famoso techo de cristal.

En la actualidad, es importante que las mujeres estemos ejerciendo como profesionistas en nuestra sociedad y funcionando como pioneras en disciplinas emergentes como el DIFAC y en las aplicaciones que ofrecen tecnologías como la IA. La presencia de mujeres, al menos en estas disciplinas, ha enriquecido la visión que se tiene respecto al manejo y tratamiento de ciertas enfermedades. Por ejemplo, se ha evidenciado la falta de representación de mujeres en estudios clínicos, lo que repercute en el espectro de efectos adversos que se estudian o contemplan al lanzar un nuevo medicamento, o bien, al darle un nuevo uso (Carrasco *et al.*, 2022). A pesar de que se ha demostrado que la respuesta a fármacos es distinta en hombres y mujeres, no se han establecido diferencias en el uso o dosificación de medicamentos, lo cual, en ocasiones se traduce en poco efecto terapéutico y mayores efectos adversos en mujeres (Alcalde-Rubio *et al.*, 2020).

Cirillo *et al.* (2020) han examinado las brechas actuales de sexo y género en las aplicaciones de IA en Biomedicina, donde se resalta que la exclusión y el sesgo que existe en los datos que se han recolectado hasta la fecha, también repercute en los modelos computacionales que se diseñan hoy en día. Es necesario que la comunidad científica sea consciente de ello y se fortalezcan iniciativas para la inclusión de datos más diversos que tengan un impacto significativo en los tratamientos y en los resultados de los pacientes, particularmente en aquellos en áreas de la medicina con necesidades insatisfechas.

HALLAR TU CAMINO A TRAVÉS DE UN ESPACIO DE POSIBILIDADES

Existe una idea falsa de que una vez que decides estudiar una carrera no hay vuelta atrás y harás eso toda tu vida, o bien, que si decides realizar estudios de posgrado tu único camino será la academia. Actualmente, el desarrollo laboral para una mujer que enfoca su carrera profesional en la Química Computacional es muy amplio, aunque probablemente limitado en términos geográficos. Para mostrar que las trayectorias profesionales no siempre son y ni tienen que ser lineales, aquí mostramos ejemplos de mujeres con esta formación desarrollándose profesionalmente en diferentes campos, desde la industria y la academia hasta en emprendimientos y política. Para tener un panorama más amplio de las investigaciones de estas mujeres puedes consultar el siguiente directorio: <http://iopshell.usc.edu/wtc/resources.html>

A nivel industrial, la Química Computacional ha influido directamente en el descubrimiento y desarrollo de fármacos y de nuevos materiales. El desarrollo de software científico y el análisis de datos químicos también se han hecho indispensables dentro de las industrias químicas. Algunos ejemplos de científicas en la industria son Georgia McGaughey (vicepresidenta en Ciencia de Datos en Vertex Pharmaceuticals), Rebecca Green (científico principal sénior en Bristol Myers Squibb), Luisa María Fraga (gerente sénior en Materiales Avanzados de Repsol) y Katharine Holloway (científica principal en Gfree Bio) quien cuenta con más de 30 años de experiencia en DIFAC y contribuyó al desarrollo de Crixivan, el primer fármaco aprobado para el tratamiento del SIDA dirigido a inhibir la proteasa del VIH.

En la academia, específicamente en el campo de la dinámica molecular, resaltan los trabajos de las doctoras Teresa Head-Gordon, Rommie E. Amaro y Zoe Cournia, esta última también desarrolló SME Ingredio, una *app* para teléfonos móviles que informa a los consumidores sobre los peligros potenciales de los ingredientes químicos en los productos alimenticios y cosméticos. En América Latina, científicas que destacan son las doctoras Carolina Horta Andrade (Universidade Federal de Goiás, Brasil), Fernanda Duarte (Chile, actualmente investigadora en la Universidad de Oxford, Reino Unido), Karina Martínez Mayorga (Instituto de Química, UNAM, México) y Laura Domínguez Dueñas (Facultad de Química, UNAM, México).

Además de la investigación, es común que científicas se desempeñen como revisoras o editoras de revistas científicas, un ejemplo sobresaliente es el del *Journal of Chemoinformatics*, en donde tres de los cuatro editores son mujeres: las doctoras Karina Martínez Mayorga, Bárbara Zdrazil (European Bioinformatics Institute) y Nina Jeliaskova (Ideaconsult Ltd).

Los institutos gubernamentales también son una opción para realizar investigación en Química Computacional. Cada vez se hace imperativo el uso de métodos computacionales para el manejo de información química en patentes y en la regulación y evaluación de medicamentos, agroquímicos, productos alimenticios y cosméticos. La Dra. Patra Volarath es un ejemplo de científica de datos con vastos conocimientos en Quimioinformática que trabaja para la Administración de Alimentos y Medicamentos de los Estados Unidos (FDA, por sus siglas en inglés).

MUJERES EN LA QUÍMICA COMPUTACIONAL

INDUSTRIA

- Farmacéutica/Biotecnología
- Química/Materiales
- Agroquímicos
- Tecnología de la información
- Software científico
- Ciencia de datos

ACADEMIA Y DOCENCIA

- Profesor/Investigador en una universidad
- Profesor/Investigador en institutos privados

INSTITUTOS

GUBERNAMENTALES

- Profesor/Investigador en institutos gubernamentales
- Regulación y patentes

INVERSIONES



EMPRENDIMIENTO

- Consultorías:
 - Ciencia de datos y DIFAC
 - Software científico
- PyMEs:
 - Desarrollo de nuevos materiales

EDITOR DE REVISTAS CIENTÍFICAS

Ejemplos:

- Journal of Chemoinformatics*
- Journal of Chemical Information and Modeling*

POLÍTICA

- Asesoramiento político
- Cargos de representación popular

ESCRITURA Y DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA

Figura 2. Espacios para el desarrollo laboral en Química Computacional (adaptado de Dong, 2020).

Por otra parte, las consultorías y las pequeñas y medianas empresas (Pymes) son ejemplos de emprendimientos. Destacamos Wendy Warr & Associates, empresa fundada en 1992 por la Dra. Wendy Warr, quien tiene cerca de 50 años de experiencia en Quimioinformática y Química Computacional y casi 20 de éstos en la industria farmacéutica. Otro ejemplo es pinely.co, empresa fundada por Rachelle Choueiri y Shabnam Safaei, que utiliza la computación cuántica y las simulaciones clásicas para optimizar sistemas químicos y desarrollar materiales y catalizadores más sostenibles.

En la política y en las inversiones también hay casos de mujeres muy sobresalientes. Angela Merkel, excanciller alemana, obtuvo su doctorado en Química Cuántica, pero se interesó en la política con la caída del muro de Berlín. La Dra. Charity Wayua (directora de Investigación sénior de IBM) puso en práctica sus habilidades como investigadora del cáncer en un paciente especial: el gobierno de su Kenia natal. Ella contribuyó a mejorar drásticamente el proceso para abrir nuevos negocios en su país, favoreciendo su crecimiento económico, nuevas inversiones y el reconocimiento del Banco Mundial.

CONCLUSIONES

Las mujeres podemos y debemos continuar aventurándonos en las áreas emergentes del STEM. Muy importante: si aspiramos a enriquecer la visión que se tiene respecto a la ciencia y sus aplicaciones en la sociedad, se deben realizar esfuerzos que incentiven la diversidad de género en sectores STEM. Como ciudadanos podemos contribuir en esta tarea externando nuestras opiniones y “alzando la voz” ante situaciones no equitativas o injustas. Mujeres científicas podemos compartir experiencias e impulsar la participación de más mujeres hacia una igualdad de género. Colegas hombres también pueden ayudar informándose y visibilizando el trabajo de sus colegas mujeres (más allá de sólo cubrir cuotas para congresos o atraer recursos a sus laboratorios).

Otra forma es evitando el *mansplaining*, respetando y no ocupando lugares como ponentes en foros y espacios destinados a compartir experiencias de mujeres científicas. Finalmente, las instituciones educativas, gubernamentales y las empresas deben asumir compromisos que aseguren espacios para las mujeres, e implementar políticas de equidad de género que garanticen que las mujeres puedan tener visibilidad, éxito y reconocimiento en todos los niveles.

La inclusión de mujeres en la Química Computacional, como se mostró en este artículo, puede poner en evidencia las consecuencias de la falta de representatividad en diversas especialidades, lo cual tiene impacto en la resolución de problemas que no habían sido considerados previamente.

AGRADECIMIENTOS

FISG, ALHC y DLPR agradecen al Conacyt, México, por las becas de doctorado CVU 848061, 847870, 888207. MGM agradece al programa Inception-PPU del Instituto Pasteur por la beca de doctorado. Las autoras expresan su agradecimiento al Dr. José Luis Medina-Franco por la excelente mentoría y por todos los comentarios y discusiones en torno a este artículo.

REFERENCIAS

- Alcalde-Rubio, L. *et al.* (2020). Gender disparities in clinical practice: are there any solutions? Scoping review of interventions to overcome or reduce gender bias in clinical practice. *International Journal for Equity in Health*. 19(1): 166.
- Carrasco, BO., *et al.* (2022). Drug repositioning with gender perspective focused on Adverse Drug Reactions. *bioRxiv*. Disponible en: <https://doi.org/10.1101/2022.07.22.501091>
- Cirillo, D., CatuaraSolarz, S., Morey, C., *et al.* (2020). Sex and gender differences and biases in artificial intelligence for biomedicine and healthcare. *npj Digital Medicine*. 3(81):1-10.
- Cuevas, G. (2005). Química computacional. *Revista Ciencias Matemáticas*. 56(2):33-42.
- Damm-Ganamet, K.L., *et al.* (2020). Breaking the glass ceiling in simulation and modeling: Women in pharmaceutical discovery. *Journal of Medicinal Chemistry*. 63(5):1929-1936.
- Dong, S. (2020). *For students wondering what they can do with a PhD in computational/theoretical chemistry (or in STEM fields in general), I made an (incomplete) list of career paths based on real-life examples. Please forgive me for mixing "roles" and "industry" here* [Twitter] 25 octubre. Disponible en: https://twitter.com/sijia_dong/status/1320445078649868288.
- Emambokus, N., *et al.* (2016). Women in Science. *Cell metabolism*. 23(5):747-748.
- Gauthier, J., *et al.* (2019). A brief history of bioinformatics. *Briefings in bioinformatics*. 20(6):1981-1996.
- Holloway, M.K., y McGaughey, G.B. (2018). Computational Chemistry: A Rising Tide of Women. *Journal of chemical information and modeling*. 58(5):911-915.
- Lu, Y., Deng, G., y Shuai, Z. (2021). Future directions of chemical theory and computation. *Journal of Macromolecular Science, Part A: Pure and Applied Chemistry*. 93(12):1423-1433.
- Saldívar-González, F., Prieto-Martínez, F.D., y Medina-Franco, J.L. (2017). Descubrimiento y desarrollo de fármacos: un enfoque computacional. *Educación Química*. 28(1):51-58.
- Stouch, T.R. (2009). A well deserved honor: Yvonne Martin, 2009 recipient of the Herman Skolnik Award. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. 23(12):829-830.
- White, G.B. (2017). Melinda Gates: The Tech Industry Needs to Fix Its Gender Problem-Now. *The Atlantic*. (16 March). Disponible en: <https://www.theatlantic.com/business/archive/2017/03/melinda-gates-tech/519762/>

Descarga aquí nuestra versión digital.

