

Al Jurado de los Premios Nacionales de la Sociedad Química de México, 2008:

Sobre la Tesis de Licenciatura: “Validación y aplicaciones de cálculos de pseudo-potenciales en el marco de la combinación lineal de orbitales tipo gaussianos en la teoría de funcionales de la densidad con el código deMon2k”: “Validation and applications of pseudo-potentials calculations in the framework of the linear combination of the gaussian-type orbitals in density functional theory with the code deMon2k”.

La obra pertenece a la categoría de la Química Teórica y muestra al lector la validación de métodos matemáticos incorporados en el código deMon2k, un eficiente programa de estructura electrónica. Esto con la finalidad de garantizar que los resultados sean obtenidos en forma rápida y con una precisión adecuada para el trabajo de investigación. En cualquier aplicación que al programa pueda dársele, los tiempos de cómputo se incrementan rápidamente con el tamaño del sistema. En ese sentido, este trabajo intelectual implicó la dedicación de un sinnúmero de horas por parte del autor en el camino de abatir este problema. Y esto porque, muchas veces, los problemas químicos más interesantes y que necesitamos resolver, como sociedad en busca de una mejor calidad de vida, no son fácilmente manejables, por lo que se hace imprescindible reducir los tiempos de cómputo. En este contexto, deMon2k resulta particularmente útil en cálculos de la Teoría de Funcionales de la Densidad, no relativistas. Hay ocasiones, sin embargo, en que no se puede ignorar la teoría de la relatividad o que se requiere trabajar con elementos donde ésta juega un papel preponderante. Este trabajo permitió validar la inclusión al programa de pseudo-potenciales, herramientas matemáticas que no sólo corrigen la necesidad de incluir la teoría de la relatividad, sino que aceleran el cálculo. Además de la validación del algoritmo computacional se realizaron algunas aplicaciones como, por ejemplo, el cálculo de un compuesto organometálico para el cual se tenía información experimental no sólo estructural sino de espectroscopia infrarroja y de resonancia magnética nuclear. También se calcularon cúmulos de cobre sustituidos para los que se contaba con datos de potenciales de ionización. Se tuvo siempre la contrastación experimental como parámetro de calidad y se lograron obtener buenas y, en algunos casos, excelentes concordancias con los cálculos teóricos. Junto con las aportaciones realizadas en la

Tesis Doctoral “Derivadas Analíticas en la Combinación Lineal de Orbitales Tipo Gaussianos en la Teoría de Funcionales de la Densidad -Métodos Pseudo-potenciales con funciones auxiliares-” (Roberto Flores-Moreno, Cinvestav, 2006), que requirió de este trabajo recepcional para dar forma a una parte de ella, es potencialmente posible calcular de forma más eficiente: energías, potenciales de ionización, excitaciones electrónicas, optimización de estructuras, estados de transición, espectros IR/RAMAN, factores Franck-Condon, propiedades magnéticas, interacciones intermoleculares, etc. Algunos de los sistemas objetivo son, entonces, compuestos organometálicos, cúmulos, tierras raras y otros sistemas grandes. Si consideramos que deMon2k es un programa público para cualquier plataforma computacional y que, con pseudo-potenciales, puede calcularse prácticamente cualquier elemento de la Tabla Periódica resulta aún más evidente la importancia de haber realizado esta obra. Además de las aportaciones académicas, fue la intención del autor que se tuviera un impacto extra. Se dio el primer paso al explorar un campo más en las opciones de titulación de los alumnos de la Facultad de Química Farmacéutica Biológica, Campus Xalapa, de la Universidad Veracruzana al ser la primer Tesis realizada en el Laboratorio de Química Teórica del Departamento de Química del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional. Así mismo, dentro de su *Alma Mater*, fue el primer trabajo para titulación realizado completamente en Inglés y en Español producto de la filosofía que se inculca desde el ingreso a la Universidad Veracruzana, respecto a egresar manejando otros idiomas y, en especial, el más usado en el ámbito de la investigación científica. Tuvo también la intención de motivar a los compañeros de la licenciatura a realizar sus trabajos en otros idiomas, cualquiera que estos fuesen, además del español, como forma de ampliar sus posibilidades académicas y con la idea que este trabajo les sirviera para practicar sus habilidades en el idioma Inglés especialmente con tecnicismos químicos. Producto de este trabajo se publicó un artículo científico (*J. Comp. Chem.* **27**, 1009, 2006) y se presentaron siete contribuciones orales y un cartel, en diferentes foros a nivel nacional.

México D.F a 14 de Octubre del 2008

---

Andreas Köster, Profesor Titular