

Andoni Garritz Ruíz: El químico teórico

José L. Gázquez*

Es para mí un honor participar en este número del Boletín de la Sociedad Química de México dedicado a recordar la destacada labor de Andoni Garritz Ruiz en el desarrollo de la química en nuestro país. Ciertamente, la mayor parte de su actividad profesional, verificada en la Facultad de Química de la Universidad Nacional Autónoma de México, estuvo orientada hacia la educación de los jóvenes en química. Esta vocación lo llevó a escribir libros de texto sobre fisicoquímica, que constituyen una aportación original y creativa sobre la enseñanza de temas complejos de fisicoquímica que requieren, normalmente, de un lenguaje matemático muchas veces difícil de seguir. Su obra contiene numerosas contribuciones planteadas con una perspectiva didáctica que reemplaza la complejidad matemática con conceptos que explican de manera clara los fundamentos de la química teórica y sus aportaciones a la explicación de la estructura y propiedades de la materia. Esta vocación también lo llevó a ser un gran profesor en el aula, logrando alcanzar altos niveles de aprendizaje por parte de sus alumnos, y a la vez influir de una manera positiva en su desarrollo como estudiantes y luego como profesionales.

Hay otra faceta importante en la actividad profesional que tuvo durante los primeros años posteriores a la conclusión de sus estudios de licenciatura, cuando cursó sus estudios de doctorado, y que nos remiten a Andoni Garritz como investigador en el campo de la química teórica. En mi opinión, esta etapa juega un papel fundamental que marcó su desarrollo posterior. Sus contribuciones a la educación química y la didáctica que emana de ellas están fuertemente permeadas por esta experiencia.

Mi contribución se refiere precisamente a esta etapa inicial de su vida profesional, en la que tuve la oportunidad de colaborar con él, y establecer una relación profesional y personal muy enriquecedora.

Andoni Garritz realizó sus estudios de doctorado bajo la dirección de Jaime Keller en el Departamento de Química Teórica de la entonces División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Química. Su trabajo de investigación estaba centrado en el estudio de la partición del espacio en técnicas de dispersión múltiple combinadas con “un potencial de intercambio estadístico” para la descripción de la estructura electrónica de moléculas. Para ubicar la importancia de este trabajo, es importante entender el contexto en el que se desarrollaba y el conocimiento que se tenía a mediados de la década de los setenta (del siglo XX).

Actualmente, la teoría de funcionales de la densidad en la formulación de Kohn-Sham es, por mucho, la técnica más utilizada para estudios de estructura electrónica de átomos, moléculas y sistemas extendidos. Sin embargo, en la década de los setenta, la situación era diferente. La teoría de funcionales de la densidad surge formalmente en 1964, con los teoremas de Hohenberg y

Kohn. Los antecedentes de esta teoría se remontan a 1927, cuando Thomas y Fermi propusieron, por primera vez, una expresión para la energía cinética de un átomo polieletrónico en términos de su densidad electrónica, en contraste con la formulación de Schrödinger basada en la función de onda. Por la naturaleza de las aproximaciones que utilizaron para derivar esta expresión, se le denominó modelo estadístico de un átomo. Poco tiempo después, en 1930, Dirac utilizó el mismo procedimiento de Thomas y de Fermi para derivar la expresión para la energía de intercambio en términos de la densidad electrónica, y a ésta se le denominó intercambio estadístico.

En 1965 Kohn y Sham reformularon el trabajo original de Hohenberg y Kohn, introduciendo un conjunto de orbitales que tienen como característica principal el que a través de ellos se determina la densidad electrónica exacta del sistema, la misma que se obtendría al resolver la ecuación de Schrödinger. La aplicación de este procedimiento al estudio de la estructura electrónica requiere de un esfuerzo computacional equivalente al de Hartree-Fock (HF). Sin embargo, la enorme diferencia es que los cálculos realizados con la formulación de HF son apenas el punto de partida para incorporar, posteriormente, la contribución de la energía de correlación, que es fundamental para describir interacciones químicas. El cálculo de esta contribución es altamente demandante desde el punto de vista computacional, por lo que aún con las supercomputadoras que se tienen hoy en día, el método en su conjunto es aplicable solamente a sistemas relativamente pequeños. En cambio, en el método de Kohn-Sham (KS) la energía de correlación está incluida desde un principio, y puede ser aplicado, con los recursos de cómputo actuales, a sistemas químicos grandes.

Es importante mencionar que desde 1951, Slater había propuesto una simplificación de las ecuaciones de HF, que resultó ser equivalente a las que se obtienen variacionalmente mediante el método de KS, aunque desde la perspectiva de Slater no se estaba incluyendo la energía de correlación, ya que se visualizaba como una aproximación a HF. En su aproximación, Slater reemplazó el potencial de intercambio de HF por el intercambio estadístico de Dirac, por lo que en los hechos estaba utilizando un funcional de la densidad electrónica para describir esta interacción. Así, desde 1951, el método de Hartree-Fock-Slater (HFS) empezó a aplicarse fundamentalmente a átomos polieletrónicos y sólidos.

*Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
jlgm@xanum.uam.mx

Estos hechos son relevantes, ya que como el método de HFS corresponde a un caso particular de KS, a partir de 1965 se integró totalmente a la formulación de KS, y con la influencia de lo que se había hecho para sólidos a nivel de HFS, en la década de los setenta se empezaron a adaptar las técnicas de estructura electrónica utilizadas en sólidos para el estudio de moléculas.

Es en este contexto y con los conocimientos que se tenían en la década de los setenta que podemos entender la importancia del trabajo que desarrolló Andoni Garritz en su tesis doctoral. En el método de dispersión múltiple aplicado a sólidos y moléculas, el punto de partida consiste en hacer una partición del espacio mediante esferas alrededor de cada átomo que compone la celda unitaria en el sólido, o alrededor de cada átomo que compone la molécula. Ya que la densidad electrónica de cada átomo decae monotónicamente conforme se va alejando del núcleo, la adición de todas las densidades atómicas constituye un buen punto de partida. Sin embargo, para cubrir bien todas las regiones físicas importantes, es necesario recurrir al uso de esferas traslapantes o de esferas truncadas. Este segundo camino se denomina método celular, y justamente surgió en la época en que Andoni Garritz realizó sus estudios de doctorado. Esta partición del espacio requería de la introducción de correcciones a los cálculos de dispersión múltiple por el truncamiento de las esferas, y no había un camino único para ello.

Los estudios de partición del espacio en moléculas realizados por Andoni Garritz constituyen, junto con el trabajo de otros autores, los primeros cálculos de estructura electrónica de moléculas utilizando el método de KS.

También es importante destacar que durante los años setenta, en las primeras aplicaciones del método de KS, la energía de intercambio se calculaba mediante la expresión de Dirac; ésta corresponde a un gas de electrones libres con densidad uniforme, mientras que en átomos, moléculas y sólidos, la densidad electrónica varía de un punto a otro del espacio. Es por ello que en la ecuación de Dirac, la densidad uniforme se substituye por la densidad en cada punto del espacio, dando lugar a lo que se conoce como la aproximación de densidad local. Dado que esta expresión subestima la energía de intercambio, en esa época se introdujo un parámetro multiplicativo, cuyo valor se ajustaba en átomos para reproducir la energía de intercambio de HF. Sin embargo, en una molécula compuesta por diferentes átomos no era claro qué valor se tenía que utilizar, lo que dio lugar a que algunos autores fijaran arbitrariamente su valor. Con la finalidad de evitar este parámetro e intentar tener una mejor descripción de este importante término, y para tomar en cuenta la no homogeneidad de la densidad electrónica, se propuso hacer un desarrollo en gradientes de densidad, e incluir el primer término. Así, la suma del término de Dirac junto con este otro término dependiente del gradiente de la densidad, proporcionaban una significativamente mejor descripción de la energía de intercambio. Este camino dio lugar, con el paso del tiempo, a lo que hoy conocemos como la aproximación de gradiente generalizado, que es ampliamente utilizada en estudios de estructura electrónica de una gran variedad de sistemas.

El funcional que utilizó Andoni Garritz en los cálculos moleculares que realizó fue precisamente el que contenía el término de Dirac y la primera corrección de no homogeneidad, de manera que, a la novedad en la aplicación del método de KS a moléculas, se le sumaba la novedad de ser de los primeros cálculos moleculares que incorporaban el gradiente de la densidad en la energía de intercambio.

Todo el detalle anterior se ha descrito para revelar la originalidad y la importancia de estos primeros estudios en el desarrollo de la teoría de funcionales de la densidad en la formulación de KS que, con el paso del tiempo (como ya dijimos) se ha convertido en la herramienta más utilizada para describir la estructura electrónica de moléculas y sistemas extendidos. Sin duda, el trabajo doctoral de Andoni Garritz constituyó una aportación importante en su momento para pensar que el método de KS ofrecía un futuro promisorio para el estudio de interacciones químicas.

Después de concluir su doctorado, Andoni Garritz dirigió algunas tesis de licenciatura y maestría, en las que se continuó avanzando en los estudios de partición del espacio. Sin embargo, ya en esa época manifestaba un gran entusiasmo por dedicarse a abordar aspectos relacionados con la enseñanza de la química y a escribir libros de texto. En estos últimos, podemos ver su profundo conocimiento de la química cuántica y su facilidad para explicar de una manera amena y clara conceptos que no son sencillos de transmitir.

En 1991-1992, cuando ya trabajaba yo en la Universidad Autónoma Metropolitana, Andoni Garritz realizó una estancia sabática con nosotros. Su presencia representó un doble beneficio. Por un lado, nuestros alumnos se vieron favorecidos de los cursos que impartió. Ya para entonces él se había dedicado fundamentalmente a temas de educación en química, y había desarrollado herramientas para mejorar los procesos de enseñanza y de aprendizaje. Sin embargo, y de manera muy positiva para nuestro grupo, Andoni Garritz se incorporó a algunos de los temas de investigación que estábamos desarrollando en ese momento. Su participación fue muy positiva, pues en las discusiones del grupo siempre aportó una visión diferente que llevó a resultados novedosos. Como resultado de esa estancia, publicamos un trabajo en el que se analizaba la reactividad química de la maleimida, utilizando el principio de ácidos y bases duros y blandos a nivel local, llevando a cabo para ello, cálculos de la blandura local de esta molécula. Este es uno de los primeros trabajos reportados en la literatura, utilizando el marco teórico que proporciona, lo que se conoce hoy en día como la teoría de funcionales de la densidad conceptual.

En mi opinión, la química teórica en México perdió, poco tiempo después de que concluyó su doctorado, a un investigador que –no tengo la menor duda– habría hecho aportaciones muy importantes en este campo. No obstante, México ganó a un excelente y muy creativo investigador en temas propios de la educación en general y de la educación química en particular, cuyas aportaciones seguirán beneficiando y motivando a muchos estudiantes.