

Semblanza del Doctor Alberto Marcial Vela Amieva, acreedor del Premio Nacional de Química *Andrés Manuel del Río* 2009, en la categoría de Investigación

José L. Gázquez

Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A. P. 55-534, México 09340, D. F., México

Es un honor para mí hacer la presentación de mi estudiante de doctorado primeramente, colega posteriormente y siempre gran amigo Alberto Vela.

Alberto Vela estudió la primera mitad de su licenciatura en la entonces Escuela Nacional de Estudios Profesionales Cuautitlán de la UNAM y la otra mitad en la Facultad de Química de la UNAM donde obtuvo el grado de Ingeniero Químico en 1980 con la tesis titulada “Distribución de Cargas Atómicas en Cálculos Moleculares por Dispersión Múltiple”, bajo la supervisión del Dr. Andoni Garritz. En 1988 obtuvo el grado de Doctor en Ciencias en la UAM-Iztapalapa con la tesis titulada “Coeficientes de Respuesta Independientes del Tiempo en Átomos y Moléculas” bajo mi dirección. Su trabajo doctoral recibió el Premio Weizmann 1990 por la mejor tesis de doctorado en Ciencias Exactas.

Desde su ingreso en el año de 1977 al Departamento de Química Teórica de la Facultad de Química de la UNAM, su interés en investigación se centró en esta disciplina, particularmente en el desarrollo y aplicación de la teoría de funcionales de la densidad. Su carrera como investigador se fue forjando desde sus estudios de licenciatura y de maestría. Durante éstos últimos trabajó en la descripción, desde la mecánica estadística y también utilizando la teoría de funcionales de la densidad, del diagrama de fases de cristales líquidos, bajo la supervisión de los doctores Alberto Robledo y Carmen Varea.

De su trabajo doctoral destacan tres contribuciones. La primera se refiere al modelo que desarrolló para la generación de los parámetros energéticos que se requieren en cálculos de Hückel extendido, para cualquier átomo de la tabla periódica, lo que ha permitido a otros autores llevar a cabo estudios importantes de sistemas con tierras raras. La segunda corresponde a lo que actualmente se conoce como la aproximación local al kernel de la blandura para la función de respuesta lineal que ha permitido explicar el comportamiento de diferencias de energías tales como afinidades protónicas o para explicar tendencias de relaciones estructura-actividad. La tercera trata sobre las bases para la determinación apropiada de índices de reactividad globales como la electronegatividad y la dureza, e índices de reactividad locales como la función de Fukui, así como la generalización de la teoría de reactividad

química al caso espín polarizado. El conjunto de trabajos de su tesis doctoral han sido citados más de 250 veces por otros autores.

Durante su estancia postdoctoral de 1993 a 1995 en el Departamento de Química de la Universidad de Montreal con el grupo del profesor Dennis Salahub, Alberto tuvo la oportunidad de adentrarse en los detalles de un código complejo de estructura electrónica molecular, como lo es el programa deMon del cual es coautor desde 1994. Adicionalmente, concretó dos contribuciones relevantes. Una se refiere al trabajo realizado en colaboración con Emil Proynov, con quien desarrolló funcionales de intercambio y correlación que fueron los



Doctor Alberto Vela Amieva.

precursores de los que hoy conocemos como la meta aproximación generalizada de gradientes, que permite calcular diferencias de energía con bastante precisión, por lo que ha sido ampliamente utilizada para estudiar propiedades termodinámicas y cinéticas de una gran variedad de familias químicas. Y la otra, en colaboración con Eliseo Ruiz, corresponde al estudio de complejos de transferencia de carga utilizando la teoría de funcionales de la densidad. Todo este conjunto de trabajos ha recibido alrededor de 320 citas de otros autores.

A partir del regreso de la estancia posdoctoral al Departamento de Química de la UAM-Iztapalapa, el doctor Vela inició su etapa como investigador independiente y su participación en la formación de recursos humanos de posgrado. En la UAM-I, en el periodo de 1995 a 1998, en colaboración con sus entonces estudiantes de doctorado, Rubicelia Vargas y Jorge Garza, desarrolló una metodología que permite estudiar la estructura electrónica de sistemas confinados, con la finalidad de simular el efecto de la aplicación de presión sobre átomos o superficies metálicas. Así, se mostró que, en el caso de los metales alcalinos, la presión induce una transición de fase electrónica donde un electrón de la capa *s* de valencia se promueve a la capa *d*, haciendo que el metal alcalino se comporte como un metal de transición. Estos trabajos detonaron una línea de investigación que día a día crece en interés por su capacidad para explicar el comportamiento de la materia cuando se somete a condiciones extremas de presión.

A su llegada al Departamento de Química del Cinvestav en 1998, el Dr. Vela, en colaboración con su estudiante de doctorado Gabriel Merino, incursionó en una rama de la investigación en Química Teórica que no estaba muy desarrollada en México, el diseño *in silico* o diseño en computadora de sistemas moleculares novedosos, que cuestionen paradigmas del enlace químico. Así, exploraron la posibilidad de existencia de compuestos con carbonos tetracoordinados planos y no tetraédricos como suele comportarse el carbono en los alcanos saturados, y encontraron que el dianión de C_2^{2-} tiene esta estructura, que es la primera que se ha reportado para el caso de un átomo de carbono rodeado de átomos de carbono. Aún cuando hasta la fecha no se han reportado experimentalmente compuestos con este esqueleto, estos resultados han incentivado esta línea de investigación, como lo indican las 142 citas que en seis años han recibido estos trabajos. En la misma línea de diseño *in silico*, se propuso la existencia de metalocenos abiertos heterolépticos y, actualmente, se han encontrado compuestos con metalocenos que contienen carbonos tetracoordinados planos y que son bastante más estables que todos los reportados anteriormente.

Hasta la fecha, Alberto Vela cuenta con 82 publicaciones internacionales con arbitraje las cuales han recibido 1397 citas que sumadas a las 698 citas como coautor del programa deMon dan un total de 2095 citas de otros autores a su trabajo, lo que pone de manifiesto la gran calidad de sus aportaciones, ya que el promedio de 17 citas por artículo está muy por arriba de los estándares internacionales más exigentes.

El doctor Vela ha graduado a tres estudiantes de doctorado, uno de maestría y seis de licenciatura. Actualmente

tiene bajo su supervisión a seis estudiantes de doctorado. Se puede afirmar que sus estudiantes graduados son exitosos investigadores independientes. Todos ellos son Investigadores Nacionales Nivel 2 del SNI, dos de ellos, Jorge Garza y Rubicelia Vargas son profesores del área de Físicoquímica Teórica de la UAM-Iztapalapa, mientras que el tercero, Gabriel Merino, obtuvo el Premio Weizmann 2003 en Ciencias Exactas y labora actualmente en la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Guanajuato.

Tanto por ser una herramienta de trabajo básica en la química teórica y computacional como por su gusto e interés, el doctor Vela ha sido y es un usuario, constante y demandante, y un promotor del desarrollo del cómputo de alto rendimiento en México. Este aspecto queda de relieve por las múltiples participaciones del Dr. Vela en comités de cómputo y por sus contribuciones a la creación del Laboratorio de Supercómputo de la UAM-Iztapalapa, su cargo como Coordinador General de Servicios de Cómputo Académico del Cinvestav y el que se le reconoce como el primero en instalar y usar una computadora paralela dentro del concepto de cúmulo en México. Hoy en día, la arquitectura de computadoras de mayor uso en los grandes centros de cómputo de alto rendimiento son los cúmulos.

En síntesis, como estudiante de posgrado, como profesor y como investigador Alberto Vela ha realizado una labor muy importante en el desarrollo y consolidación de la fisicoquímica teórica en México, ya que se trata de una persona con una cultura científica muy amplia, con una gran capacidad para profundizar en los temas de investigación que ha abordado, con enormes habilidades para trabajar en colaboración y en equipo, y con una notable capacidad para motivar tanto a los estudiantes, como a los profesores con los que ha compartido su espacio de trabajo. Así, la huella que ha dejado en su paso por la UNAM y por la UAM ha sido importantísima en el desarrollo de la fisicoquímica teórica en estas instituciones, mientras que en el Cinvestav fue él quien integró y consolidó este campo. Su huella ha quedado también plasmada en la formación de recursos humanos de alto nivel, ya que quienes estudiaron el doctorado bajo su dirección son actualmente miembros destacados de la comunidad científica mexicana. Podemos afirmar que el doctor Alberto Vela es uno de los pilares de lo que podríamos denominar la escuela mexicana de la teoría de funcionales de la densidad y sus aplicaciones a estudios de reactividad química, que ha alcanzado un gran reconocimiento a nivel mundial.

Es importante señalar que toda su formación y, prácticamente toda su investigación las ha realizado en México, participando de esta forma, de manera notable, en la consolidación de las instituciones mexicanas y en el crecimiento de las tradiciones científicas en nuestro país.

Indudablemente, el Dr. Vela ha contribuido de manera extraordinaria al desarrollo de la química y de la educación superior en México, por lo que el otorgamiento del Premio Nacional de Química Andrés Manuel del Río constituye un importante reconocimiento a su notable trayectoria y un estímulo para que continúe participando activamente en el desarrollo de la educación superior y la ciencia en México.