

## Educación y Oportunidad

Discurso del profesor Antonio José Hernández, en ocasión de su investidura como Profesor Emérito de la Universidad Simón Bolívar.

### I.- Saludos y Agradecimientos Iniciales

Sr. Rector, Profesor Enrique Planchart; Sr. Vicerrector Académico, Profesor Rafael Escalona; Sr. Vicerrector Administrativo, Profesor William Colmenares; Sr. Secretario, Profesor Cristian Puig; Sres. Jefes de División, Decanos, Coordinadores y Jefes de Departamento que representáis en este acto a las distintas unidades académicas de la Universidad; Profesores; Estudiantes; Invitados; Familiares y Amigos.

Me siento gratamente honrado al tener esta oportunidad, y en este momento tan especial, para poder expresar unas palabras de agradecimiento por el conferimiento de Profesor Emérito de la universidad Simón Bolívar. En primer lugar, agradecer a mis colegas del departamento de Química por proponer mi nombre para este prestigioso reconocimiento, y al Consejo de la División de Ciencias Físicas y Matemáticas por realizar la postulación ante el Consejo Directivo de la USB. Me siento honrado de pertenecer al grupo de Profesores Eméritos de esta universidad, alguno de los cuales son colegas químicos de insigne trayectoria.

### II.-Significado de Emérito

Muchas personas ajenas al ámbito académico me preguntan sobre el significado de un reconocimiento tan pomposo como el de Profesor Emérito, por lo que una breve descripción es importante: “El Consejo Directivo podrá designar profesores eméritos a profesores Titulares jubilados de la Universidad Simón Bolívar que hayan acreditado condiciones sobresalientes en la docencia o en la investigación. Los Profesores Eméritos podrán continuar en la investigación y colaborar en la docencia”. En pocas palabras, los profesores eméritos podrán continuar siendo profesores universitarios, y la Universidad les ofrece la posibilidad de seguir ejerciendo su labor académica, después de jubilados, contando con todos los beneficios de infraestructura y financiamiento disponibles.

### III.- Academia y Oportunidad Histórica

No hay nada más difícil que hablarles de logros académicos personales. Por esa razón prefiero hablar sobre la oportunidad histórica única presentada por la democracia ante mi generación, la cual explica en gran parte el éxito académico alcanzado.

Corría el año 1958, un año singular y pleno de acontecimientos que marcó la historia académica de toda una generación de jóvenes venezolanos. El estado recibía ingresos cada vez mayores bajo la forma de regalías y derechos de concesión por la explotación petrolera. El estado, en tales circunstancias, asumía un papel cada vez más importante en la economía y en la vida social. Los recursos eran cuantiosos y permitieron la consolidación de un sistema de educación pública cualitativa y cuantitativamente importante. Los liceos, muchos de ellos recién fundados y con laboratorios bien dotados, ofrecían una educación secundaria de calidad con profesores a dedicación exclusiva, muchos de ellos, autores de textos académicos en sus respectivas especialidades, lo cual inspiró a un grupo importante de jóvenes de mi generación a estudiar carreras científicas.

La primera Facultad de Ciencias del país fue fundada ese mismo año en la Universidad Central de Venezuela. La misma representaba una institución en pleno desarrollo, pujante y con una plantilla de excelentes profesores nacionales e internacionales. En la década de los años 60, se observa un acentuado crecimiento de la matrícula universitaria, en el contexto de una política de ampliación de oportunidades educativas extensivas a todos los estratos de la población. Numerosos compañeros estudiantes, venidos de todos los rincones del país, hijos de humildes hogares venezolanos, todos cobijados con la esperanza de serles útiles a una sociedad, que sin egoísmos, les brindaba todos los medios a su alcance para adquirir conocimientos profesionales en un área científica de gran relevancia para nuestra industria petrolera y petroquímica. Tuvimos la fortuna de contar con excelentes profesores e investigadores provenientes de Norteamérica y de Europa. Adicionalmente, hubo una inmigración de talentos suramericanos que venían

escapando de regímenes totalitarios, de modo que también contamos con profesores chilenos, argentinos y brasileños de alto nivel. Nos manteníamos estudiando con gran afán y mística, muchas veces proclamando con orgullo y pedantería los conocimientos científicos recién adquiridos por los pasillos de la Escuela de Química: Erwin Schrödinger, James Maxwell, Ludwig Boltzmann, Max Planck, Otto Diels, Kurt Alder, Robert Woodward, Roald Hoffmann, Geoffrey Wilkinson, Karl Ziegler, Nicolas Carnot, Rudolf Clausius, Josiah Gibbs...eran entonces nuestros héroes personales. Eran tiempos marcados por una efervescente actividad política contagiada por las luchas de la denominada renovación universitaria, y de donde surgirían líderes políticos que perdurarían en el tiempo. Nuestra incorporación a la investigación en los diversos laboratorios especializados, dirigidos en su mayoría por investigadores de reconocida trayectoria internacional, marcaba la fase final para la culminación de nuestros estudios universitarios de pregrado, el “Trabajo Especial de Grado”. Para muchos, esta fase de culminación de los estudios fue excitante, significó el comienzo de la carrera de investigador; sirvió para revelar nuestra verdadera vocación, la pasión por la adquisición de información para entender, verificar, corregir o aplicar este nuevo conocimiento.

La mayoría de los graduados de la Facultad de Ciencias de la UCV en los años sesenta y comienzo de los setenta, tomaron el sacrificado sendero de la vida académica en universidades, institutos universitarios y centros de investigación del país. Algunos tuvimos la gran oportunidad de ser contratados en la recién fundada Universidad Simón Bolívar (USB). Una Institución Pública de Educación Superior de carácter eminentemente científico-tecnológica, orientada hacia la creatividad y la innovación interdisciplinaria, con una dinámica organizacional matricial, novedosa, y comprometida a contar con una plantilla de profesores de excelencia, cuidadosamente escogidos, tanto a nivel nacional como internacional. Recuerdo los albores de mi vida profesional como profesor Instructor en el departamento de química de la USB. Como muchos de mis colegas recién graduados, comenzamos a darle forma a nuestros sueños de convertirnos en educadores e investigadores en universidades, institutos universitarios y en los institutos de investigación públicos o privados del país. El plan de desarrollo profesoral de la USB contemplaba la formación a nivel doctoral de sus jóvenes instructores, por lo que se nos brindó todo el apoyo institucional para que accedieran a las becas de postgrado ofrecidas

por los organismos del estado. La oportunidad de obtener un doctorado en las mejores universidades del mundo no se hizo esperar. Financiados por el recién creado CONICIT, la mayoría de mis colegas vivimos la enorme experiencia cultural y humana de establecernos por periodos prolongados de tiempo en países muy diversos, con el objetivo de prepararnos como investigadores e innovadores, y acometer luego el enorme reto de “*crear escuela*” en Venezuela.

Al finalizar nuestros estudios doctorales, sentimos la cálida acogida de nuestras “*academias*”, al proveer sin reparos medios financieros para dotar nuestros laboratorios con el equipo necesario para ejercer la docencia y la investigación competitiva a nivel internacional, lo cual permitió desarrollar nuestro potencial como profesores e investigadores de universidades y centros de investigación del país. Hoy día, ya disfrutamos de nuestra condición de titulares en los institutos y universidades que nos permitieron desarrollar nuestra carrera académica, podemos mirar con satisfacción el largo y duro camino recorrido, y ver con esperanza el que todavía nos queda por recorrer. Vemos con igual satisfacción los egresados universitarios que ayudamos a formar, fruto de nuestro trabajo y dedicación a estas instituciones. Nos sentimos útiles y realizados por el servicio prestado a nuestro país, y por dejar un legado a las siguientes generaciones. No poseemos bienes de fortuna, pero en cambio tenemos la inmensa felicidad de trabajar en lo que siempre nos gustó hacer. Citando al físico teórico Lee Smolin de la universidad de Waterloo en Canadá: “En el fondo, los científicos somos gente con suerte: podemos jugar a lo que queramos durante toda la vida”.

#### IV.-Academia y Oportunidad Futura

Los recursos petroleros eran cuantiosos y en Venezuela se desarrolló un rápido proceso de modernización, el cual continuó ininterrumpidamente hasta el final de la década de los años 70. En pocas décadas el país se urbanizó intensamente, se edificó un sistema de educación pública de calidad, se desarrollaron acciones efectivas de saneamiento ambiental, se creó una infraestructura importante de comunicaciones, transporte y servicios públicos. Con un crecimiento económico sostenido, Venezuela parecía destinada a integrar el selecto grupo de las naciones desarrolladas del planeta. Desafortunadamente, el modelo rentista mostraría sus

defectos, y sólo hubo que esperar algunos años para que este se pudiese manifestar con toda su devastadora intensidad. El crecimiento del sistema de educación público se estancó y se abandonó una gran parte de las acciones de rutina destinadas a la creación de infraestructura y de su mantenimiento. Esto afectó la infraestructura existente, la dotación de los laboratorios, y las condiciones laborales en los liceos públicos. El constante crecimiento de la universidad, caracterizada por sus cuantiosos aportes científicos y tecnológicos, también sufrió por los repetidos recortes presupuestarios.

Esta crisis presupuestaria ha mermado de manera significativa la calidad académica de la Universidad, la cual ha perdido toda posibilidad de retener a sus mejores talentos, acumulados durante décadas entre profesores y egresados. A pesar de la crisis, se impone perseverar para mantener el nivel de calidad de la Universidad, para ello se debe estimular y fortalecer la creación de conocimiento y prestar mayor atención al capital humano. La tarea docente de los profesores debe ser valorada como un ingrediente fundamental de la función universitaria, conjuntamente con la investigación y la responsabilidad social, para garantizar la superación de las desventajas sociales. Venezuela requiere de unas instituciones sólidas y permanentes en el tiempo que permitan el desarrollo y máxima utilización de las capacidades de los científicos y tecnólogos de nuestras universidades y centros de investigación.

Es indiscutible el valor que tienen las universidades para el desarrollo y crecimiento de las naciones y de su liderazgo en ciencia, innovación y tecnología, así como en la promoción de sus actividades sociales, culturales y económicas. Los países más exitosos son los que reconocen que la ciencia es la matriz del progreso de una nación, y destinan una fracción importante de sus ingresos de capital al desarrollo de universidades y centros de investigación de altísimo nivel. Las universidades son reconocidas internacionalmente por sus resultados en investigación y por el número de sus profesores con visibilidad internacional. La mayor riqueza de un país es el conocimiento, lo cual solo se logra a través de un sistema educativo de calidad y un recurso humano bien formado. La universidad debe formar profesionales creativos, abiertos a nuevas ideas y a la diversidad, que se integre a la comunidad del conocimiento global y aporten sus conocimientos en beneficio de la sociedad. La comunidad científica de Venezuela está en la obligación de señalar las rutas a transitar en el desarrollo de la Ciencia, la Tecnología y la Innovación, en

su tránsito hacia una sociedad del conocimiento, que nos ayude a resolver los enormes problemas y desigualdades que nos aquejan.

## V.-Trabajo Académico

Las características del premio obligan a hablar sobre mi trabajo académico, lo cual asumo como un breve recuento histórico de mi contribución a la evolución de la hoy día denominada “Química Computacional”.

Al final de los años 60, de la mano del Prof. Eduardo Ludeña, comencé mis primeros pasos en la química teórica, con el estudio cuántico de la estructura electrónica de las moléculas de  $\text{Li}_2$  y  $\text{F}_2$  y sus propiedades de localización espacial. El trabajo utilizó una computadora central (*mainframe*) IBM S/360 propiedad de la Asociación Pro-Venezuela, localizada en la Zona Rental de la UCV. En la década de los años 70, durante mis estudios doctorales en la Universidad de Indiana, trabajé con el Prof. Peter Langhoff en la aplicación de “Funciones de Green”, derivadas a partir de “Teorías de Perturbación Diagramáticas”, para el cálculo de Energías de Correlación, Energías de Ionización y Afinidades Electrónicas en sistemas multielectrónicos. Adicionalmente, trabajé con el Prof. Donald McQuarrie en el campo de la Termodinámica Estadística, en el modelaje molecular para la determinación de Coeficientes de Actividad y Solubilidad de Aminoácidos Alifáticos en Solventes Polares. Estas investigaciones utilizaron una computadora central CDC-3600 propiedad de la universidad. Es importante mencionar, que el modelaje molecular en química cuántica consume enormes recursos computacionales, y ciertamente estas grandes computadoras centrales o “*Mainframes*” carecían de los recursos de cómputo necesario para la eficiente simulación de estos experimentos virtuales. La poca memoria rápida disponible hacía imperativo el subdividir el procedimiento global en varias etapas consecutivas, preservando la data parcial resultante en cintas magnéticas. Esto se traducía en largas horas dedicadas únicamente a cargar y correr repetitivamente “*in situ*” los programas y la data necesaria. Adicionalmente, su enorme costo era una limitación importante para su uso en investigación en muchas universidades y centros de investigación.

A finales de la década de los 70, habiendo finalizado mis estudios doctorales, y ya incorporado como profesor en el departamento de Química de esta casa de

estudios, desarrollé diversos modelos Diagramáticos de Perturbación para el cálculo de la “Energía de Pares” de sistemas atómicos y moleculares. Los cómputos necesarios se realizaron en un minicomputador VAX-11/780 propiedad de la USB. El mismo representaba entonces un sistema multiusuario, de relativa versatilidad y poder de cómputo, el cual levantaba las antiguas restricciones de memoria impuestas por los sistemas centrales anteriores por una fracción del costo, y que finalmente permitió la computación remota desde el edificio de Química y Procesos. A pesar de estos avances de “*hardware*”, todavía la química computacional sufría de serios obstáculos de “*software*” para su consolidación como herramienta de uso general. Aunque existía el intercambio académico de algunos programas de utilidad en química cuántica, no existían todavía paquetes académicos o comerciales de cálculo de propiedades moleculares de uso generalizado. Solo pocos grupos de investigación a nivel mundial estaban en capacidad de escribir el extenso y complejo código fuente a ser utilizado en las simulaciones de procesos y cálculos de propiedades moleculares de interés químico. Durante los años 80, junto a los Doctores Fernando Ruetter, Anibal Sierralta y Eduardo Ludeña (todos del IVIC), la Profa. Morella Sánchez (IUT) y el Prof. German Castro (UCV), logramos reparametrizar programas de orbitales moleculares semiempíricos, solo disponibles a través de colaboraciones académicas, para usarlos en la comprensión y caracterización de las propiedades de adsorción en Catálisis Heterogénea. Las minicomputadoras disponibles en los centros de computación del IVIC y en la USB, nos proporcionarían los recursos remotos adecuados para la realización de estas investigaciones.

A finales de esa misma década, surgió la relación con el grupo de Física Molecular del Prof. Geerd Dierksen, en el Instituto Max Planck de Astrofísica en Múnich, Alemania. Mi colaboración con este grupo comenzó al recibir de la Fundación Alejandro de Humboldt una beca de investigación en 1988. Este reconocimiento es de carácter vitalicio, con la posibilidad de financiamiento en la adquisición de equipos, la publicación de artículos científicos y en las pasantías de investigación bilateral. La misma, permitió el desarrollo de la aplicación “*OpenMol*”, destinada al cálculo de propiedades y estructura electrónica en átomos y moléculas. La guía al usuario, la evaluación y análisis de resultados, y el aprendizaje asistido por computadora, eran características únicas implementadas en “*OpenMol*”. La mayor relevancia práctica de esta herramienta fue su diseño para ser utilizada eficientemente en “Estaciones de Trabajo Multiprocesadoras”. Esta combinación

permitió dividir las pesadas simulaciones computacionales en química cuántica en tareas más pequeñas, las cuales podían entonces ser resueltas concurrentemente. Esto abrió la excitante posibilidad a muchos centros de investigación de acceder a recursos eficientes de computación con relativo poco presupuesto. El uso de estos nuevos desarrollos nos permitió la determinación, con muy alta precisión, de los momentos dipolares y las polarizabilidades de campo y de gradiente de campo de moléculas diatómicas de interés astrofísico. Similarmente, estos desarrollos nos permitieron por primera vez la descripción precisa de interacciones intermoleculares débiles del tipo van der Waals. Estas interacciones son de naturaleza dispersiva y mantienen unidas muy débilmente a gases nobles y a moléculas como CO y H<sub>2</sub>, por lo que su caracterización y descripción cuantitativa constituía para la época un enorme reto en el campo de la química asistida por computadora.

La donación de “estaciones de trabajo” multiprocesadoras de alto rango, provenientes de la Fundación Humboldt y de la HP de Venezuela, permitieron fundar en el año 1990 el laboratorio de “Química Computacional” en nuestra universidad. En el mismo, se produjeron importantes resultados correspondientes a la caracterización espectroscópica de complejos de tipo van der Waals, de altísimo interés astrofísico en el medio interestelar, los que permitieron a varios estudiantes alcanzar su grado académico, tanto de licenciatura como de maestría y doctorado. Los presentes integrantes del Laboratorio de “Química Computacional y Óptica”, la Profa. Mary Salazar, el Prof. José Luis Paz y el Prof. Lorenzo Echeverría, conjuntamente con el Prof. Ramón López-Plánes (UDO), el Prof. Carlos Manzanares (Universidad de Baylor, Texas), el Prof. Henry Castejón (Universidad de Wilkes, Pensilvania) y el Prof. Geerd Dierksen (Instituto Max Planck de Astrofísica, Munich), hemos proseguido esta línea de investigación en nuestro laboratorio, con la descripción exitosa de los espectros de excitación de diversos sistemas intermoleculares: N<sub>2</sub>-He, CO-He, CO-Ar, He-CO<sup>+</sup>, CO-Li, H<sub>2</sub>-Li, CO-H, BF-H, BF-He, CO-H<sub>2</sub> y N<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>. Adicionalmente, hemos producido trabajos recientes de investigación en el área de Óptica No-Lineal con el empleo de la técnica de I-SCAN, técnica de Fluorescencia de absorción de dos fotones y con el empleo de las propiedades ópticas absorptivas y dispersivas de sistemas moleculares en diferentes solventes. En otras líneas de investigación, cabe señalar la colaboración en el área de Físicoquímica Orgánica con el Dr. Gabriel Chuchani y el Dr. José Mora (ambos del Centro de Química del IVIC), y la Profa. Tania Córdova de la Escuela de Química de la UCV.



El breve recuento bibliográfico anterior establece firmemente la estrecha relación existente entre el desarrollo de nuevas tecnologías de computación, y el esfuerzo continuado de investigación metodológica en química teórica, para la consolidación del campo que conocemos hoy como “Química Computacional”. El desarrollo tecnológico de los sistemas de cómputo científico, comenzando con las enormes y muy costosas “Computadoras Centrales”, pasando por las más eficientes y más accesibles “Minicomputadoras”, a las recientes, más económicas y altamente eficientes “Estaciones de Trabajo Multiprocesadoras”, tuvo un gran impacto en la evolución de este campo de investigación. La “Química Computacional” fue reconocida como un campo independiente de estudio en 1988, cuando Walter Kohn y John Pople fueron reconocidos con el premio Nobel de Química por su trabajo en métodos computacionales de la química cuántica. La importancia de esta disciplina fue reconocida nuevamente en el año 2013, cuando la Academia de Ciencias Sueca otorga a Martin Karplus, Michael Levitt, y Arieh Warshel el Nobel de Química por su trabajo pionero en el desarrollo de los modelos computacionales usados hoy día.

Las herramientas de cómputo moderno, configuradas como un arreglo de poderosas computadoras de escritorio unidas mediante redes de alta velocidad, disponen hoy día de memoria rápida y económica y de almacenamiento externo ilimitado, lo cual impulsa con fuerza la consolidación y el desarrollo de nuevos paquetes académicos y comerciales de uso general en la simulación de procesos químicos y cálculo de diversas propiedades moleculares de interés. La capacidad de estos “Arreglos de Computadoras”, facilitan la combinación e interface de previos bloques aislados de código existente, y los integra para ofrecer una amplia variedad de herramientas para el uso de los “químicos en general”, disponibles todas en un único paquete computacional; el cálculo de energía y de superficies de energía potencial, optimización de geometrías, cómputo de momentos multipolares, polarizabilidades e hiperpolarizabilidades estáticas y dinámicas, determinación del espectro IR, espectro visible y RMN de moléculas individuales, determinación de coordenadas de reacción, propiedades cinéticas y termoquímicas de reacciones químicas, mecánica y dinámica molecular en procesos bioquímicos y ambientales, son solo algunas de las más notables capacidades ofrecidas hoy por los programas existentes.

La “Química Computacional” se ha convertido en una herramienta indispensable para investigación, el modelaje y la optimización de los procesos químicos, para la

caracterización e innovación en materiales de interés y estratégico en muchas áreas académicas y tecnológicas, y para explorar procesos físicos básicos con fenómenos subyacentes tales como, superconductividad, almacenaje de energía, susceptibilidades magnéticas y cambios de fases. En las propias palabras de la Real Academia Sueca de Ciencias, con motivo del Premio Nobel de Química 2013: “Los modelos computarizados que reflejan la vida real se han vuelto cruciales para la mayoría de los avances en la química moderna”. Solo los nuevos desarrollos en tecnología de computación nos podrán dar idea de cuál será la evolución de este campo.

## VII.-Agradecimientos Finales

Expreso mi mayor agradecimiento a nuestra universidad, por su cálida acogida, y por todo el apoyo brindado desde el inicio de mis labores docentes y de investigación hasta el presente, para equipar y mantener funcionando adecuadamente nuestras líneas de investigación. A los colegas que me acompañaron desde los comienzos del departamento de química, dondequiera que se encuentren, mi más profundo agradecimiento por su colaboración y amistad durante todos estos años. Extiendo también este agradecimiento a mis colegas químicos presentes, por su dedicación, su valentía y su enorme decisión por preservar la herencia académica de sus predecesores en el Departamento de Química. Mi infinita gratitud a mis estudiantes, por haber compartido conmigo esta excitante travesía de investigación.

Para finalizar, deseo agradecer a mi familia por su constante apoyo durante todos estos años. A mis padres, quienes lamentablemente ya no se encuentran entre nosotros. Mi más especial y sentido agradecimiento al orgullo más grande de mi vida: mis hijos, Daniel, Denise y Daniela, y mis nietos, Santiago y Andrés. También tengo que agradecer a mi esposa, la Profa. Mary Carmen Salazar, por su compañía, apoyo, consejo y cariño durante los últimos 30 años. Gracias a todos ustedes por honrarme con su presencia en esta ceremonia.