

Presentación de libro “Curso de química cuántica”

Feria del Libro Universitario, UAM-I
Septiembre 25, 2024
UAM Iztapalapa

Participantes:

Dr. José Luis Gázquez Mateos, *Departamento de Química, UAM- Iztapalapa*
Dr. Renato Lemus Casillas, *Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM*
Dr. José Andrés Cedillo Ortiz, *Departamento de Química, UAM- Iztapalapa (Autor)*

Andrés Cedillo:

Buenos días a todos. Es un gusto estar aquí en la presentación del libro “Curso de química cuántica” [UAM-I, 2023].

Yo soy el autor de este libro, Andrés Cedillo, del Departamento de Química y es un placer enorme compartir esta sesión con José Luis Gázquez, profesor emérito de nuestra universidad, y con Renato Lemus, que es investigador del Instituto de Ciencias Nucleares en la UNAM. Ambos con una experiencia enorme en la química cuántica, pero también con una experiencia enorme en términos de la docencia de ésta. Me da mucho gusto estar aquí, aunque sea a la distancia, porque este libro tiene una historia larga.

Este libro surge de mi experiencia docente en la UAM Iztapalapa en los distintos cursos que están relacionados con la química cuántica. El primer curso que me tocó impartir de química cuántica fue en 1991 en la licenciatura en química y nueve veces me tocó dirigirlo. En ese tiempo [el curso] estaba dividido en dos trimestres. Entonces teníamos realmente un periodo largo de veintidós semanas de trabajo y el origen del libro proviene justamente de preparar el material necesario para veintidós semanas de clase.

El libro desde luego, como cualquier libro de texto, no tiene su origen inmediato en el periodo docente. Lo que uno hace normalmente es que selecciona el material, lo organiza y lo va uno utilizando en diferentes ocasiones y se va modificando. Todo esto nos llevó después de más o menos unos doce años para tener completo todo el material del libro. En aquel momento habían solamente doce capítulos. Este libro no solamente tiene el origen en estos cursos, también ha habido cursos del posgrado en química, ha habido cursos en el CINVESTAV. Y es el motivo justamente, por los diferentes cursos que trata de cubrir, que apareció el capítulo número trece de las propiedades eléctricas y magnéticas de las moléculas. Ésta es una aplicación muy bonita de la mecánica cuántica a los sistemas químicos en presencia de campos eléctricos y magnéticos.

Entonces, realmente el libro cubre los aspectos teóricos básicos de la mecánica cuántica aplicada a los sistemas químicos y nos permite justamente tener material suficiente para los cursos de licenciatura y de posgrado de la química cuántica [esto se refiere] tanto a la licenciatura en química, como al posgrado en química [de la UAM]. Por diferentes razones, hemos ido cambiando algunos detalles y actualmente los programas se han modificado, pero el curso tal cual como se ha preparado es útil, es suficiente, para la docencia que hacemos en la UAM Iztapalapa y seguramente para la docencia que se puede realizar en otros lugares.

Algo que es interesante es que hace 2 años, estando de sabático por España, en la capital de Asturias, que es Oviedo, yo le pregunté a todos los colegas teóricos que andaban por ahí si ellos conocían algún libro de texto escrito originalmente en español de química cuántica. Y, en la memoria de mis colegas, no hay evidencia de algún otro libro originalmente escrito en español de química cuántica. Desde luego que en México, en España y en algunos otros lugares del continente americano, hay libros de texto escritos en español de mecánica cuántica y sabemos que en portugués se escribió un libro de química cuántica. Pero en español aparentemente, hasta donde la memoria de los colegas españoles que consulté, se sabe que no hay otro libro originalmente escrito en español. Tenemos obras principalmente del inglés y del francés. Entonces para mí fue interesante enterarme de esto, ya que el libro estaba en sus etapas finales de producción.

La primera versión escrita completa más o menos remota de 2002. En 2004 se hizo una primera versión electrónica de material y 2022 se inició la edición ya en formato TeX del libro de texto, es el que nos permite realmente tener un diseño mucho más apropiado.

En este proceso hubo tres proyectos de servicio social involucrados, tres alumnos cubrieron diferentes fases de este proceso y, bueno, pues un gusto tener un libro como éste que se ha terminado y ojalá que en unas cuantas semanas pudiéramos tener algunas versiones impresas. Me dará mucho gusto poder dejar una a cada uno de los miembros de esta mesa. Algo que también quisiera yo comentar es la influencia que tuvo mi formación para la escritura de este libro. Tienen una componente enorme los cursos de mecánica cuántica que yo tomé en la maestría en física en la UAM. Esto me permitió ver una forma ligeramente diferente de la que vemos en los grupos tradicionales de Química. Y eso me da un enfoque que no es exclusivo en este libro porque hay libros en inglés que tienen una estructura parecida y un grado de profundidad similar. Esto es algo que es interesante comentar y también el hecho de que actualmente todos los capítulos de este libro se pueden utilizar con diferente grado [de detalle] para diferentes cursos de licenciatura y posgrado. Entonces, éste es más o menos el panorama que tiene la producción de libro.

Me gustaría darle la palabra a nuestro invitado, el Dr. Renato Lemus del Instituto de Ciencias Nucleares de la UNAM, y si nos pudiera comentar acerca de su impresión.

Renato Lemus:

Muchas gracias, Andrés.

A mí me tocó leer con cierto cuidado este libro y quiero decir que es un placer tener un libro en español, [que se hizo] con gran esfuerzo, porque [para] escribir un libro como éste se necesitan muchos años. A través de todos los esfuerzos de la docencia, aprende uno de los alumnos, aprende uno y como sabemos la estructura es personal. Nosotros escribimos un libro de acuerdo a la historia personal de uno, en particular. Y sí, hay muchos libros de mecánica de química cuántica y mecánica cuántica. Pero como hizo notar Andrés, los libros se crean para un propósito particular de una universidad y de un país particular y en un idioma, el cual es nuestro, al menos así lo veo yo.

Libros de mecánica cuántica y química cuántica hay muchísimos en inglés, todos en inglés. Pero quiero hacer notar lo siguiente. Los libros, por ejemplo, en Alemania se escriben en alemán y después se traducen al inglés. Los libros en Rusia se escriben en ruso y después se traducen. ¿Por qué nosotros tenemos que tomar libros de otras experiencias?

La ciencia evidentemente es ciencia y es internacional, pero los libros escritos aquí en español son muy valiosos porque establecen una relación particular entre el profesor y la experiencia con los alumnos y el material. Cuando uno da los cursos, al menos en este tipo de universidades públicas, uno tiene libertad de escoger las cosas. Y el material que está aquí es un reflejo de la libertad que tuvo Andrés para poder expresar la química cuántica, los fundamentos. Entonces, el libro está estructurado de tal manera que uno empieza con algo simple, no es como los libros de mecánica cuántica tradicionales donde se necesita mucho material, mucha física para poder empezar a leer. Aquí empieza poco a poco y uno se va familiarizando y esa es la idea de esto.

Aparentemente es muy simple al principio, pero después empieza a ser más formal, empieza realmente a tener ciertas dificultades en cuanto al esfuerzo del alumno por aplicarlos y ayuda mucho en cuanto a que hay resultados aquí, metodología que no está [descrita] en la mayoría de los libros tradicionales de química cuántica. [Libros de] Química cuántica hay desde elementales, muy elementales y hay muy complicados. Y este libro es de diferentes grados. Desde para empezar a familiarizarse con la química cuántica, hasta llegar a aplicaciones formales, o complicadas. O sea, que sí requieren de un gran esfuerzo y el nivel puede ser más allá de la licenciatura. Entonces, este libro efectivamente se puede utilizar tanto para licenciatura como para maestría, posgrado, depende de [los] diferentes capítulos [elegidos].

El libro tiene básicamente lo que todos los libros, al menos en lo global, tienen. Lo que es momento angular, acoplamiento del momento angular, que es fundamental, y los métodos

aproximados. Todo eso lo tiene, pero me llama la atención que las aplicaciones particulares que escogió Andrés son interesantes, o sea, son particulares, y varias de ellas no están en los libros comunes. Sobre todo cuando está en la mecánica cuántica con aplicaciones a la química. Es decir, "Bueno, ya tengo un formalismo de mecánica cuántica y quiero ver para qué sirve. ¿Para qué sirve en dónde?". Pues para qué sirve en química, no para para qué sirve en física. Para el físico son importantes las soluciones analíticas. Cuando hay solución analítica, el físico dice yo quiero la solución analítica. Una cosa es encontrar la solución analítica, y el físico la aprecia por sí misma. Pero el químico necesita algo que le sirva y dice "¿Para qué me sirve eso?". Y este libro muestra ciertas aplicaciones interesantes, sencillas, incluso la de una partícula en una caja con paredes infinitas. Que es la primera aplicación de un texto. Qué rara, porque eso de paredes infinitas y las soluciones son raras. Pero [incluso] aquí hay aplicaciones interesantes.

Después va con con la química cuántica [de sistemas] con partículas idénticas y el formalismo de Dirac, qué significa tener partículas idénticas y cómo se debe de hacer para fermiones y para bosones. Y, después, en química cuántica son los fermiones los importantes. En el sentido de cómo nosotros debemos de tomar en cuenta eso para resolver un problema electrónico, pues los electrones son complicadísimos. Yo siento que los bosones son más nobles para tratar que los fermiones. Y, bueno, ¿esto se trata de los fermiones!

Entonces, resumiendo, pues a mí es un placer estar involucrado aquí en esta presentación con un libro en español que requirió un gran esfuerzo y ojalá hubiera más esfuerzos de estos. Qué cada curso, qué cada gente que da muchos años el curso escribiera un libro con su experiencia. Libros en español originales de este tipo yo nada más conozco el libro de mecánica cuántica que se utiliza en parte como texto en la Facultad de Ciencias. ¿Cómo se llama?

Andrés Cedillo:

¿El de Manuel de Llano?

Renato Lemus:

No, hay uno de Manuel del Llano que es relativamente corto. Pero uno grande, ya de muchos años. Yo me acuerdo que desde el 90 ya había salido.

Andrés Cedillo y José Luis Gázquez:

¿De la Luis de la Peña?

Renato Lemus:

El de Luis de la Peña, exactamente. Desde hace 30 años yo conocí su edición, hace más de 30 años, cuando era estudiante todavía de licenciatura en los últimos semestres. Y, bueno, ahora se puede adquirir el nuevo y es mucho más rico, más detallado y con más ejemplos. Ese es un ejemplo que tiene muchos años y está enfocado para físicos. Entonces, a un químico cuántico, en mi opinión, pues no le es de gran utilidad.

Este es un esfuerzo muy importante y me da mucho gusto. Y quiero felicitar a Andrés por todo este trabajo que presentó aquí. Muchas gracias.

Andrés Cedillo:

Gracias Renato por tus comentarios y gracias por el trabajo que has hecho.

Ahora le pedimos a José Luis Gázquez que nos comente acerca de su opinión después de haber visto y revisado [el texto].

José Luis Gázquez:

Muy bien, muchas gracias por haberme invitado a participar.

Empezaré por decir que yo conocí a Andrés cuando él fue mi alumno en un curso que era del primer semestre de la Facultad de Química, se llamaba fisicoquímica uno, y era una introducción a la química cuántica. Así que lo tuve como alumno en ese curso, ahí fue cuando lo conocí. Pues me da muchísimo gusto ver, después de tantos años, que haya producido una obra que me parece que es muy relevante. Voy a repetirme un poco en algunas cosas, porque así sucede.

Empezaría justamente por mencionar que creo que sí había una necesidad de tener un libro introductorio a la química cuántica en español. Escrito en español de origen. Y, en español, efectivamente, como Andrés constató con el grupo de españoles, yo [tampoco] tengo en mi memoria ningún libro propiamente de química cuántica. Tenemos un libro excelente que escribieron Andoni Garritz, Diana Cruz y José Antonio Chamizo sobre átomos. Más bien es la teoría atómica y entonces no es un libro propiamente de química cuántica. Sirve como preliminar para poder entrar en un libro como el que nos presenta Andrés. Y existen otros, pero no se abocan directamente a la química cuántica. Ya se mencionaron aquí, por ejemplo, dos que están más vinculados con la mecánica cuántica, con un enfoque más hacia la mecánica cuántica. Aunque la química cuántica nace de la mecánica cuántica, si tiene sus particularidades y sí requiere justamente de un tratamiento particular.

Y, con todo esto me preguntaba yo, ¿quién mejor que Andrés Cedillo para escribir un libro de química cuántica? Porque los que lo conocemos sabemos que tienen una gran capacidad didáctica. Andrés es muy claro en sus explicaciones, es muy riguroso desde el punto de vista matemático. Con todo el rigor que él emplea tanto en su trabajo de docencia como en su trabajo de investigación, está empapado de un rigor matemático muy importante. Además él tiene un conocimiento muy profundo de la química cuántica. Entonces, creo que reúne características muy positivas para haber sido quien escribiera éste, que para mí, es el primer libro de química cuántica en español.

A mi me gustaría comentar que hay varios libros escritos en otros idiomas, particularmente en inglés, de química cuántica. Son buenos libros. Particularmente el libro de Ira Levin, que ya va en la séptima edición, ha sido el libro que se ha utilizado por muchísimas generaciones para enseñar la química cuántica. Es un libro que tiene una gran didáctica y que va desarrollando los diferentes temas de una manera muy amplia y clara.

Pero yo destacaría en esta obra que nos presenta Andrés, que desde mi punto de vista, yo he sido un usuario muy asiduo del libro de Levine en los cursos que he impartido de química cuántica, me parece a mí que la construcción como la hace Andrés en este libro y el orden en que va viendo los temas, desde mi punto de vista, supera a lo que es el libro de Levine. El libro de Levine es muy bueno y a través de él uno puede aprender mucho. Pero en mi experiencia docente creo que Andrés pone el orden adecuado. Hay varios puntos muy sutiles que, por ejemplo, el libro de Levine trata en otro momento y que uno muchas veces como profesor tiene que irlos adelantando. Eso es lo que yo encontré en una primera visión del libro de Andrés. Me parece que la construcción y el orden son extraordinarios, Y desde mi punto de vista superan a un libro tan importante como es el de Levine.

Desde luego, como ya se mencionaba, creo que aborda todos los temas que se requieren para una introducción a la química cuántica. Arranca con los temas básicos, pero que requieren siempre el tratamiento para ir aprendiendo a manejar la ecuación de Schrödinger. Abordar problemas sencillos para ver cómo son sus soluciones y que aportan una gran didáctica de cómo enseñar toda esa parte. Creo que esa primera parte está muy bien tratada y ahí es donde creo que Andrés introduce elementos muy importantes que le da un tratamiento muy sencillo a temas complicados. Toda esa parte de la introducción prepara muy bien al estudiante para los siguientes temas. El que se enfoca en estructura electrónica de átomos, por un lado, y luego el último tema que se aboca a la estructura electrónica de moléculas. Me parece también que ahí supera justamente al libro de Levine. La parte de átomos es muy clara y la construcción que nos presenta es muy lógica. Y la parte de moléculas hace una síntesis muy positiva de la química cuántica propiamente. Cuando hablamos de química cuántica estamos hablando justamente de estructura electrónica de moléculas. Creo que cubre todos los temas muy bien. Aborda la parte de métodos semiempíricos, la superficie de energía potencial y también la parte del movimiento nuclear. [Este tema] muchas veces no aparece en los libros de química cuántica, aparece mucho más adelante, un poco en los libros que tienen que ver con espectroscopía, pero a mí me parece

que es un tema muy relevante para que el alumno tenga una visión más integral. Porque uno se la pasa hablando de electrones y ¿qué pasó con los núcleos? Más allá de que estén ahí para confinar a los electrones. Creo que el conjunto de todos los temas que cubre es muy bueno y, además, como él menciona, la parte final de campos magnéticos y eléctricos es también muy relevante. Son temas que aparecen más en libros más avanzados de química cuántica. Sin embargo aquí le da un tratamiento muy adecuado, Andrés, con todo el soporte de lo que presentó antes.

Me parece que es un libro muy completo, diría un libro muy completo desde la perspectiva de la función de onda, en el abordaje en términos de la función de onda. Y pues a mí no me queda más que felicitar a Andrés por este excelente trabajo y señalar que sin duda yo lo pienso utilizar en mis cursos.

Andrés Cedillo:

Muchas gracias por la revisión, José Luis, y gracias también por los comentarios personales.

Yo creo que como bien comentaba Renato Lemus, la forma en que uno termina plasmando sus ideas para el material de un curso evidentemente tiene una componente altamente personalizada. Uno tiene una experiencia de vida atrás, tanto en la parte formativa como en la parte de la docencia cotidiana. El libro de química cuántica, así como lo tenemos ahora, pues realmente fue la labor no solamente de dar los cursos, sino de ir probando diferentes formas de presentar el material. De tal forma que no solamente fuera consistente, sino que fuera de alguna forma un seguimiento lógico, que haya una cadena de conceptos que vayan apareciendo en diferentes niveles de complejidad, desde lo menos complejo hasta lo más complejo.

Me parece que una de las cosas que me tocó aprender, y, que tanto Renato como José Luis quizás lo recuerden, es que también ellos contribuyeron al proceso formativo en diferentes etapas y en diferentes niveles. Y estoy muy agradecido también por el hecho de que conocí a José Luis en los primeros días de mi trabajo universitario y que conocí a Renato Lemus también en los primeros años de mi etapa como estudiante de licenciatura. En la etapa en donde apenas yo iba aprendiendo los primeros conceptos de química, tuve también la oportunidad de recibir muy buenos consejos de ambos.

Yo les pediría a los invitados si pudieran comentar un poco acerca de la bibliografía que existe disponible para los cursos de química [cuántica] de nuestras universidades en México. En la bibliografía del libro aparecen unas cuantas referencias de libros clásicos y de libros contemporáneos que tiene un estilo similar en términos de estructura y de profundidad. Sin embargo tenemos traducciones al español de diferentes obras y libros de química cuántica, como bien comenta José Luis, como el libro de Levine y hay algunas más. Sin embargo, por alguna razón no usamos todo el material que está disponible justamente porque no siempre lo podemos adaptar a nuestros cursos. Entonces no sé si pudieran hacer un comentario breve acerca del material que está disponible y si pudieran hacer una comparación adicional sobre esta obra. Y ojalá que pudiera ser de interés también para los asistentes y para aquellos que podrán escuchar más adelante esta presentación en los medios.

Puede iniciar el Dr. Lemus.

Renato Lemus:

José Luis mencionó el de Levine, que es el primer libro, por ejemplo, que yo también tuve contacto en química cuántica. Pero un libro similar es el McQuarrie. McQuarrie tiene muchos libros, bueno no muchos libros. El primer libro de McQuarrie que conocí es el de mecánica estadística, porque lo llevábamos en la maestría. Buscando, al paso del tiempo, encontré el de química cuántica. Y el de química cuántica es muy similar al de Levine y muy claro también. Ese creo que no está traducido al español, al menos yo no lo conozco. ¿No sé si ustedes lo conozcan? Yo más que todo he estado involucrado en los de mecánica cuántica. Conozco los de química cuántica, pero los libros avanzados. Yo lo que quiero hacer énfasis es en que el libro que escribió Andrés es particular de la necesidad de un curso que él estaba desarrollando y eso es lo fundamental. O sea, a través de ese curso él va teniendo ideas. Uno escribe un libro y uno no

dice "bueno, pues yo ya tengo el plan, me voy a poner a escribirlo y lo terminé." No, así no es. Uno se va alimentando de los estudiantes porque uno ve las dificultades en los estudiantes para ciertos puntos. Entonces, uno tiene que explicarlo con más detalle. Y no solamente eso. Como uno está en investigación a uno se le van ocurriendo materiales adicionales y uno no termina. Si hubieran otros diez años, el libro terminaría con cien hojas más con todas las aplicaciones que a Andrés se le ocurrirían en su experiencia. Pero el libro tiene que terminar en algún momento. El libro no es muy largo, no es un libro de 800 páginas, es un libro de 270 más o menos y está muy bien estructurado y condensado, con el material que uno necesita para empezar con la química cuántica. Me gustó mucho, de veras. Y bueno con respecto a la demás bibliografía, libros que empiecen en nivel elemental hasta [el] más avanzado, pues no hay muchos. Generalmente el de nivel elemental y se queda ahí en elemental. Pero este libro tiene partes que son avanzadas. En mi opinión, uno necesita más conocimiento que el elemental que yo estudié en un libro tradicional de química cuántica.

Muchas gracias.

José Luis Gázquez:

Ante tu pregunta, yo recuerdo en particular el libro del Pilar, de química cuántica. Ese es un libro que a lo mejor se puede considerar como un poquito más avanzado, porque aborda algunos temas más avanzados. Me parece que es un libro muy bueno. Es un libro que está bien escrito y que explica temas más complicados de una manera muy clara, pero sería para una segunda etapa. No tanto para la parte introductoria. También mencionaré yo que, al menos a mi me pasa en los cursos, cuando le doy la bibliografía a los estudiantes, con todo el crecimiento que tuvo la química teórica, la química cuántica, al desarrollarse las computadoras y al aparecer estos códigos de estructura electrónica de acceso prácticamente universal, como que hubo un viraje en términos de la visión de la química teórica, química cuántica. Y empezaron a salir muchos libros que de hecho el título no es de química cuántica, es química computacional. O alrededor de eso de química computacional. Sin embargo, una buena parte del libro se refiere a la química cuántica. Como que hubo ese cambio, ese viraje en el tiempo. Y creo que es bueno, como ahora nos lo presenta Andrés volver a repensar un poco en la enseñanza de la química cuántica, pero no necesariamente a través de como lo hace la química computacional, que se enfoca más en la parte de cálculos, de cómo hacer los cálculos y cómo obtener resultados. Y dejan de lado la parte más básica.

Entonces es lo que ha venido pasando, que actualmente vemos que el mercado casi podríamos decir que está inundado de libros de química computacional y ya no vemos tanto libros que se aboquen a los elementos de la química cuántica. Hay otro punto muy importante, el conocimiento va evolucionando, el conocimiento que se tiene va cambiando, van apareciendo nuevas cosas. Y también hay libros, aunque son de química cuántica, van más dirigidos a esas nuevas visiones. Por ejemplo lo que tenemos en la teoría de funcionales de la densidad, que aparece como un campo *per se*, muy importante.

Andrés Cedillo:

Muchas gracias. Estamos ya sobre el tiempo de la presentación. Entonces para no alargar más el tiempo y podamos desocupar la sala para el siguiente evento. Yo creo que sería un buen momento para que si hay alguna intervención del público se manifestara.

Quiero nuevamente agradecer a los dos miembros del panel, que son especialistas, tienen mucha experiencia en estos temas, que también contribuyeron en alguna medida a mi formación y, por lo tanto, a lo que este libro ahora es. Muchas gracias a ambos.

¡Entonces, vamos! Si el público alguien tiene preguntas o comentarios hacia los miembros del panel o hacia el autor, con gusto trataríamos de dar respuesta.

Público:

Yo soy Marcelo Galván. Es un comentario/pregunta. A mi me tocó vivir muy de cerca, junto en la UAM, el proceso de cómo ibas desarrollando en libro. Y siempre me inquietó el hecho de

¿cuándo terminar?, ¿cómo decidir qué ya está listo para la gente lo lea? Es una decisión que cualquier autor enfrenta y es difícil. En la literatura hay estudios de cómo los escritores van haciendo sus correcciones y cuadran las cosas y todo eso. El comentario es esta idea de virar un texto a la práctica común, ligarlo y alimentarlo de esa práctica común, que tiene un impacto en el tiempo en el que se desarrolla esto. Tiene la virtud de que se adapta, eso le da un valor en el futuro. Pero mi pregunta concreta es ¿cuáles son los elementos que te hicieron decir que ya acabé? Tú bien lo dijiste. A mi me tocó ver que pasaban los años y uno te decía ya sácalo. Pero el rigor de Andrés es bien conocido. Entonces me gustaría saber ¿cuáles fueron los elementos que te hace decidir que ahora si ya está listo? Es una pregunta que también hago a los otros investigadores, que momento deciden que ya.

Andrés Cedillo:

Bueno. Esta pregunta es complicada. Me parece que el libro originalmente terminó en doce capítulos, pero cuando hicimos cambios en la universidad, de los planes y programas de estudio, específicamente del posgrado, me quedó claro que había que añadir algo más. Algo más, que si lo dejábamos solamente en la clase, no era suficientemente, porque el material cada vez se va complicando y, como bien lo dice Renato, tenemos una sucesión de temas y de aplicaciones que están basadas en lo que vamos construyendo a lo largo del libro. Entonces, en mi opinión, este punto final esencialmente son las necesidades docentes. El tener un tiempo fijo para impartir cursos y un conjunto de temas también más o menos bien definidos nos pone ciertos límites. Yo también tengo la impresión de que si siguiera yo con una versión preliminar, yo creo que crecería el libro en algunas otras partes. Justamente porque no cesa uno de tener ideas, desarrollarlas, y de ir las incorporarlas al texto. Entonces se dio la situación de que ya teníamos unos programas aprobados y ya no había mucho más que añadir de acuerdo con nuestros planes y programas. Y por esa razón, el punto final fue cuando escribí el capítulo trece, decidí que ya no iba a haber más capítulos. Todo el trabajo se dedicó justamente a la parte de edición, a la parte de mantener homogeneidad en el texto y en la nomenclatura. Y también toma tiempo tener una versión final presentable, que ya tenga cara de libro, que no sean solamente notas que tenemos guardadas en nuestro cajón. Esta es más o menos la forma en que este libro vio su punto final.

Público:

Buenos días, muchas gracias por la presentación. Humberto Laguna del Departamento de Química de la UAM, del Área de Química Cuántica. Quiero comentar que Andrés nos envió el pdf de libro, la primicia, yo pienso, a algunos colegas del Departamento. Hace dos trimestres yo utilice algunas partes en el curso de Química Cuántica Avanzada del posgrado y me gustó. Me pareció pertinente y lo encontré útil en el ejercicio de ese curso que era de nivel posgrado. Quisiera preguntarle a Andrés y a los panelistas que basado en la idea de que los cursos de química cuántica en las licenciaturas en química en el país, que aquí llevamos también, son considerados por parte del alumnado como cursos complicados, como parte de los cursos difíciles. Me gustaría preguntarles, en este contexto, si pueden identificar el problema o algunos de los problemas principales que enfrenta la docencia para el tema de la cuántica para las personas que estudian química. ¿El problema es que no tienen la base de lo que necesitan o es el interés? No sé. Por ahí quisiera preguntar.

Andrés Cedillo:

Yo le pediría primero a los panelistas que dieran sus comentarios. José Luis, por favor.

José Luis Gázquez:

Gracias.

Creo que si enfrentamos dificultades. Primero quiero decirles que, dado que soy viejito, durante muchísimos muchísimos años no había cursos cuántica en las carreras de química. Sorprendentemente había más físicoquímica en la carrera de ingeniería química que en la carrera de química. Llevó un buen tiempo el lograr que se tomara en cuenta que la cuántica era básica para la formación de un químico y que debían aparecer estos cursos ya con un nivel más allá de lo que ves en una química introductoria, un curso más formal de la química cuántica. Y yo creo

que enfrentamos mucho en la enseñanza de la cuántica la debilidad en la formación matemática de los estudiantes. Muchos de los estudiantes que tenemos no pasan, por ejemplo, por un curso de funciones especiales. Algo que les haga tener un mayor contacto con las matemáticas propias de la química cuántica. Creo que hay un freno ahí, muchas veces, porque cuesta trabajo superar esas deficiencias. Por ejemplo, es a lo que yo me refería cuando hablaba de cómo está construido el libro de Andrés, la manera en cómo va llevando los conocimientos, justamente ayuda a que el estudiante a la vez, a través de ejemplos sencillos donde las soluciones son sencillas, pero vaya aprendiendo conceptos muy profundos. Y que vaya viendo como se aborda, en general, el tema de estructura electrónica desde el punto de vista de la química cuántica. Sí creo que hay dificultades en la formación matemática y creo que de alguna manera se pueden, en cierta forma superar, a través del mismo curso en la forma en como uno lo aborde.

Renato Lemus:

Esto que menciona José Luis Gázquez es muy importante. Uno puede explicar las cosas de dos maneras. Uno, suponiendo que ya existe un conocimiento, y otro, suponiendo que no existe nada. Entonces, eso llevará más tiempo, pero a veces es necesario. A veces es necesario explicar conceptos que uno podría dar por conocidos, pero que la gran mayoría no los tiene, aunque uno suponga que sí.

Y quiero enfatizar en este texto que, por ejemplo, lo de funciones especiales, por ejemplo, uno dice, bueno, no llevó un curso de funciones especiales, pero bueno, las funciones especiales pues me las empiezan a presentar conforme vayan apareciendo y eso es lo que hace Andrés. Ahora tenemos los polinomios de Hermite, ahora tenemos los polinomios de otro, los diferentes polinomios y van surgiendo y va estudiando esos polinomios, como hacerlos como parte de la química cuántica. No como una cosa externa,

Yo recuerdo que cuando yo quise entrar al Departamento de Química Teórica, cuando quería hacer mi tesis de licenciatura, platiqué con Andoni Garritz. Y Andoni Garritz, no sé por qué, me dijo, "Para entrar conmigo necesitas un curso de variable compleja y cursos de funciones especiales". Yo lo pienso ahorita y digo que eso es una barbaridad. No sé en qué estado excitado estaba Andoni Garritz, posiblemente decayó en algún momento. Pero yo, en lo personal me dije "es que esto no puede ser". Pero si me fui, me fui a la Facultad de Ciencias y me puse a estudiar. Y me metí a los cursos de variable compleja donde era para puros matemáticos y era teorema/ demostración, teorema/ demostración. Y al final dije "bueno y ¿a qué hora voy a aprender a integrar por el teorema del residuo?". No eso es en el curso dos, variable compleja dos. Yo creo que si se necesitan los fundamentos idealmente, pero que uno puede irlos enseñando en ese momento con analogías. Analogías que uno tiene del espacio vectorial, pues uno tiene los tres vectores: i , j , k . Y puede uno imaginarse cómo se ven en funciones y hacer la similitud de las funciones con el espacio que conocemos, euclidiano, y cosas de esas. Igual considero yo lo de las funciones especiales y los complejos. Uno puede tratar de introducirlo en el momento que uno los necesite. Porque si uno se espera tener variable compleja uno, variable compleja dos, el f eti y todo eso, pues uno se queda ahí, a estar preparado para la química cuántica.

Andrés Cedillo:

También yo creo que hay una situación que es complicada. En particular, los estudiantes de la UAM llevan suficientes cursos de matemáticas para poder comprender la mayoría de los conceptos que están presentes en el mundo de la fisicoquímica, y en particular de la química cuántica. Y también llevan cursos de física en el primer año para complementar su formación.

Me parece que la situación más compleja que tenemos desde el punto de vista docente es que aunque los alumnos hayan aprobado sus cursos, los desconectaron prácticamente en el seguimiento de su trayectoria académica. Y no sólo para el curso de química cuántica, Humberto, me parece que desde el curso de termodinámica uno, cuando uno tiene que calcular el trabajo a través de la integral de línea. El problema no es si es una integral diferente a las tradicionales o no. El problema es que tampoco recuerdan cómo hacer integraciones. Y si les preguntamos ¿qué cosa es la fuerza?, ¿qué cosa es el trabajo? y ¿qué cosa es la energía?, a veces ya no lo recuerdan.

Entonces sí tenemos un problema en términos pedagógicos, de que todo lo que no usamos por uno o dos trimestres, muchas veces termina cayendo en el olvido. Y no tenemos una forma de ir reconectando este tipo de conceptos, de diferentes disciplinas o de la misma disciplina, que nos permita realmente lograr un aprendizaje significativo. Y esto algo que tenemos que estar trabajando todavía más en nuestra universidad.

Público:

Andrés, estamos sobre el tiempo pero si quiero mencionar algunas palabras. Soy Jorge Garza, del Departamento de Química, integrante del Área de Fisicoquímica Teórica, y ahora estoy en la gestión como Jefe de Departamento.

El trabajo que ha presentado Andrés en esta obra representa mucho para nuestra Área de Fisicoquímica Teórica, para el Departamento de Química. Seguramente lo va a leer mucha gente, lo vamos a usar muchos como libro de texto. Pero lo que quería mencionar es algo sobre la trayectoria de Andrés. Él está en un proceso prejubilatorio, está a punto de dejarnos, de dejar el campus.

Quería mencionar por ejemplo que este evento, este tipo de actividades de la Feria del Libro Universitario lo organiza la Coordinación de Extensión Universitaria de nuestra unidad Iztapalapa. Y no sé porque motivos, yo no tuve que meter mi mano ahí, el único libro que se presenta por parte de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería es el de Química y, en particular, del profesor Andrés Cedillo.

Esto Andrés de veras que me da muchísimo gusto. Estás a unos cuantos días de concluir tu prejubilatorio, estar frente a las cámaras, ante todos nosotros, compartiendo algo de todo lo que has hecho, has aprendido y has dado a nuestra universidad. Y me parece que fue un momento muy atinado. Fue atinadísimo que invitaras a comentar tu libro al Dr. Renato Lemus y al Dr. José Luis Gázquez. No ha habido peros ni objeciones hasta aquí, estamos perplejos, pero realmente lo que nos han enseñado cada uno de ustedes es de lujo. ¡Qué bueno va quedar esto en la memoria digital de nuestras redes sociales! Y, Andrés, desde aquí te mandamos un gran abrazo, todo nuestro reconocimiento y nuestra admiración.

Gracias.

El panel:

¡Gracias!

Andrés Cedillo:

Gracias. Gracias nuevamente a los panelistas por su participación. Y agradecer igualmente a los coordinadores de la feria y a los asistentes.

¡Muchas gracias!