

D. RODRIGO ALCÁNTARA PUERTO, Director del Departamento de Química Física de la Universidad de Cádiz.

INFORMA:

Que el Prof. Dr. D. Manuel Fernández Núñez, como Colaborador Honorario de nuestro Departamento, ha venido realizando, durante el curso 2014/2015, tareas de colaboración científica en el ámbito investigador, así como tareas de asesoramiento docente en temáticas que le son afines. Se propone que estas tareas tengan continuidad para el curso 2015/16.

En el ámbito investigador, en este curso se han revisado y mejorado los programas realizados en conexión con las tesis de D. Víctor Jesús García Hernández [1] y de D. David Zorrilla Cuenca [2]. En la primera de estas dos tesis se había comenzado a elaborar un programa, denominado UCA-GSS, que obtiene ajustes gaussianos de orbitales cuya parte radial es cero a partir de cierto valor del radio. En la otra tesis se había desarrollado un programa para realizar cálculos atómicos y moleculares ab-initio (HF y MP2) con funciones de base que se anulan a partir de un valor el radio, recurriendo a técnicas Montecarlo especiales para resolver los problemas de integración. Las versiones nuevas de los programas han corregido los problemas numéricos que se presentaban con cierta frecuencia. En particular se ha introducido cuádruple precisión en los puntos más conflictivos de los cálculos. Al considerar ya terminado el programa UCA-GSS, se ha intentado publicarlo en *Computational Physics Communications*, para lo que se ha redactado el artículo: SOFTWARE TO OBTAIN ACCURATE GAUSSIAN EXPANSIONS FOR STANDARD AND SPATIALLY RESTRICTED FUNCTIONS (Victor García-Hernández*, David Zorrilla-Cuenca, Jesús Sánchez-Márquez and Manuel Fernández-Núñez.), que está pendiente de envío. Se está redactando otro artículo: SIMPLIFIED BOX ORBITALS FOR H TO Ar ATOMS: EXACT EXPRESSIONS AND SBO-nG APPROXIMATIONS. (Victor García, David Zorrilla*, Jesús Sánchez and Manuel Fernández). En este artículo se hace un uso intensivo del programa UCA-GSS, por lo que será un buen apoyo para lograr la publicación del primero. Por el momento, el programa UCA-GSS, que ha sido usado y citado en [3] y [4], está a disposición de cualquier interesado en la web del departamento.

Bibliografía citada:

- [1] V.J. García Hernández: "*Empleo de funciones de base espacialmente restringidas en el estudio teórico de las moléculas orgánicas*", Universidad de Cádiz 2011.
[2] D. Zorrilla Cuenca: "*Cálculo teórico de las propiedades moleculares mediante bases no estándar*", Universidad de Cádiz, 2001.

D. Francisco Javier Navas Pineda, Secretario del Departamento de Química Física de la Universidad de Cádiz,

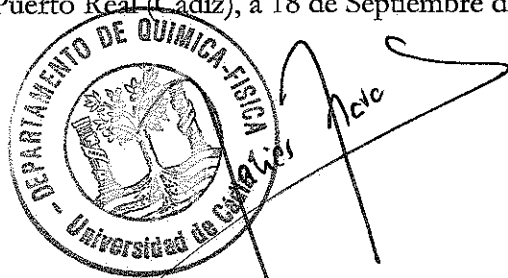
CERTIFICA:

Que en la sesión del Consejo de Departamento celebrado el día 14 de Septiembre de 2015, se aprobó para el Curso Académico 2015/2016, la renovación de los siguientes Colaboradores Honorarios:

- D. Manuel Fernández Núñez
- Dña. M^a José Feliu Ortega

Lo cual hago constar a los efectos oportunos.

Puerto Real (Cádiz), a 18 de Septiembre de 2015



Fdo.: Francisco Javier Navas Pineda