

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 2015/2016, 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 2016/17.

En el ámbito investigador, en este curso se ha continuado la investigación sobre funciones de base para cálculos químico-cuánticos iniciada en [1] y [2], encontrando funciones de base espacialmente restringidas para los átomos con $1(\text{H}) \leq Z \leq 18(\text{Ar})$ que permiten realizar cálculos en sistemas con muchos más átomos que las bases estándar, con un nivel de exactitud parecido. Las características y resultados de la nueva base se han publicado en [3].

Asimismo, se ha revisado y ampliado el programa UCA-GSS, realizado inicialmente en conexión con las tesis doctorales de D. Víctor Jesús García Hernández [4] y de D. David Zorrilla Cuenca [5]. En la primera de estas dos tesis se había comenzado a elaborar el programa, 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 dado del radio, recurriendo a técnicas Montecarlo especiales para resolver los problemas de integración. La versión nueva del programa ha corregido la mayoría de los problemas numéricos que se presentaban con cierta frecuencia, y ha sido modificada para que sea mucho más fácil de utilizar. En particular hemos modificado el output de manera que los resultados puedan introducirse directamente en programas de cálculo teórico de propiedades moleculares como el conocido GAUSSIAN.

Por el momento, el programa UCA-GSS, que ha sido esencial para desarrollar las publicaciones [2] y [3], está a disposición de cualquier interesado en la web del departamento, pero se enviará en breve un artículo describiendo el programa a la revista *Int. J. Comp. Chem.*

Bibliografía citada:

- [1] V. García, D. Zorrilla y M. Fernández: *Int. J. Quant. Chem.* **113**, 2172-2179, (2013).
[2] V. García, D. Zorrilla y M. Fernández: *Int. J. Quant. Chem.* **114**, 1581-1593, (2014).

- [3] V. García, D. Zorrilla, J. Sánchez-Márquez y M. Fernández: *Int. J. Quant. Chem.* **116**, 1303-1312, (2016).
- [4] V.J. García Hernández: "*Empleo de funciones de base espacialmente restringidas en el estudio teórico de las moléculas orgánicas*", Universidad de Cádiz 2011.
- [5] D. Zorrilla Cuenca: "*Cálculo teórico de las propiedades moleculares mediante bases no estándar*", Universidad de Cádiz, 2001.

Y para que así conste, expido y firmo el presente informe en Puerto Real, a 14 de septiembre de 2016.



Fdo.: Rodrigo Alcántara Puerto
Director del Departamento

VICERRECTORADO DE ORDENACIÓN ACADÉMICA Y PERSONAL



Universidad
de Cádiz

Facultad de Ciencias
Departamento de Química Física

Campus Universitario de Puerto Real
Pol. Río San Pedro, 11510 Puerto Real (Cádiz)
Tel. (34) 956 016 328 Fax. (34) 956 016 288
http://www2.uca.es/dept/quimica_fisica/
e-mail: dept.quimica-fisica@uca.es

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

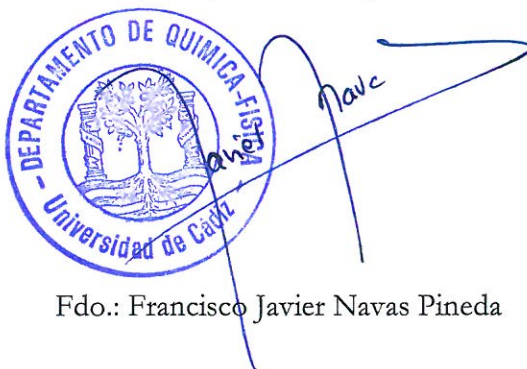
CERTIFICA:

Que en la sesión del Consejo de Departamento celebrado el día 14 de Septiembre de 2016, se aprobó para el Curso Académico 2016/2017, 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 19 de Septiembre de 2016



Fdo.: Francisco Javier Navas Pineda