

Crónica de los inicios de la química cuántica y la informática química en el Uruguay (1966-1974)

GERMÁN KREBS

Ingeniero químico egresado de la
Facultad de Química en 1971.
germankrebs@hotmail.com

Resumen

Esta crónica corresponde a un lapso de aproximadamente ocho años, de 1966 a 1974, hace medio siglo, período durante el cual fui un joven docente e investigador de la Facultad de Química de la Universidad de la República. Contiene información, algunos documentos, referencias y mis puntos de vista sobre los inicios y la evolución de la química cuántica y la informática en la Facultad.

Antes de 1966 - Espectroquímica (Ver nota al pie *)

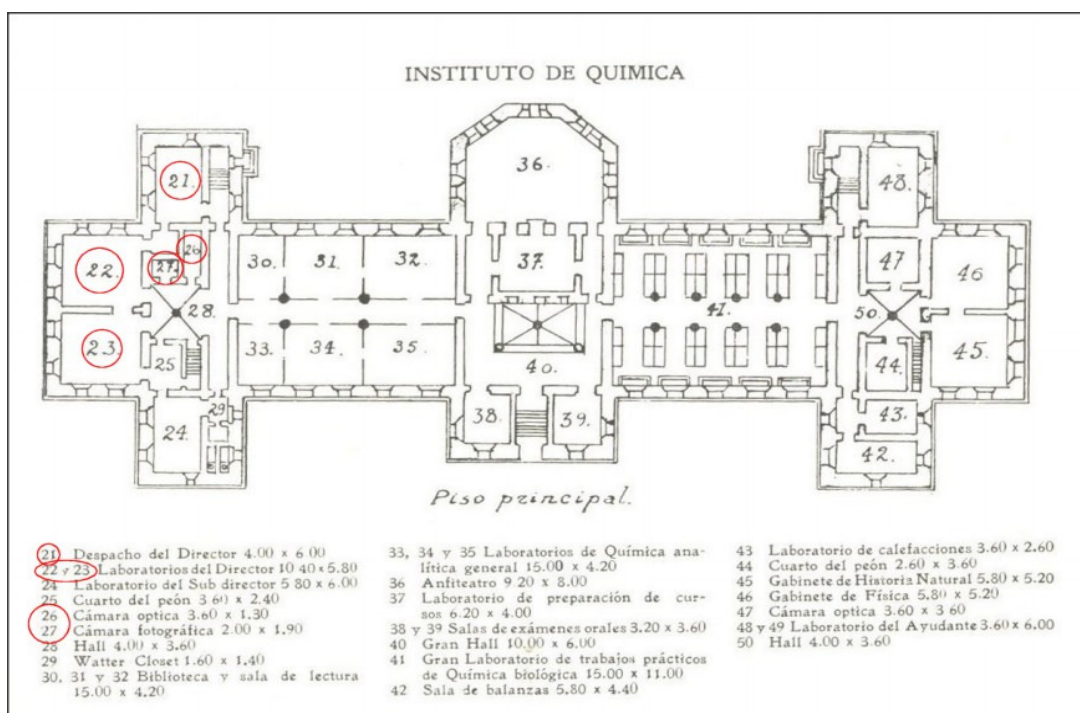
Hasta la época de referencia, en los programas de las carreras de química no había menciones a la química cuántica ni a la informática aplicada a la química. Solo se utilizaban en forma cualitativa algunos conceptos derivados, como *configuraciones electrónicas u orbitales*.

El sector de la Facultad de Química donde arranca esta crónica es la Sección Espectroquímica. Esa sección tenía como jefe al profesor Ramón Sosa y sus equipos principales eran un espectrógrafo y un espectrofotómetro.

Algunos datos históricos del marco en el que se desarrolló la formación de Sosa se encuentran en el relato de Moyna y otros [[Ref. 1](#)].

La Sección Espectroquímica estaba ubicada en lo que fueron las oficinas y laboratorios del Director del Instituto (ver a ámbitos 21, 22, 23, 26 y 27 en el plano que se muestra a continuación).

(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.



Plano de ubicación de la Sección Espectroquímica (tomado de [Ref.2]).

El espectrógrafo era marca Hilger, con prisma de cuarzo y registro sobre placa fotográfica. Disponía de una fuente de corriente para alimentar electrodos de arco (corriente continua) y de chispa (alterna de alto voltaje).

SCIENCE February 10, 1950, Vol. 111

**Pound Sterling Devaluation Means
NEW LOW PRICES
on British Optical Instruments**

HILGER LARGE
FULLY AUTOMATIC
QUARTZ
SPECTROGRAPH
Ask for catalog H-1

Prism and Grating Spectrographs
Microphotometers, Source Units and Accessories
Microscopes—Medical, Stereoscopic, Ultra-Violet
Polarizing, Metallurgical
Polarimeters and Saccharimeters
Refractometers—Abbe, Pulfrich, Projection,
Differential
Ultra-violet Spectrophotometers
Infra-red Spectrophotometers
Monochromators and Spectrometers
Raman and Vacuum Spectrographs
Interferometers

Write for catalogs
JARRELL-ASH COMPANY
164 Newbury Street Boston 16, Mass.
"If it's an optical instrument, think of Jarrell-Ash!"

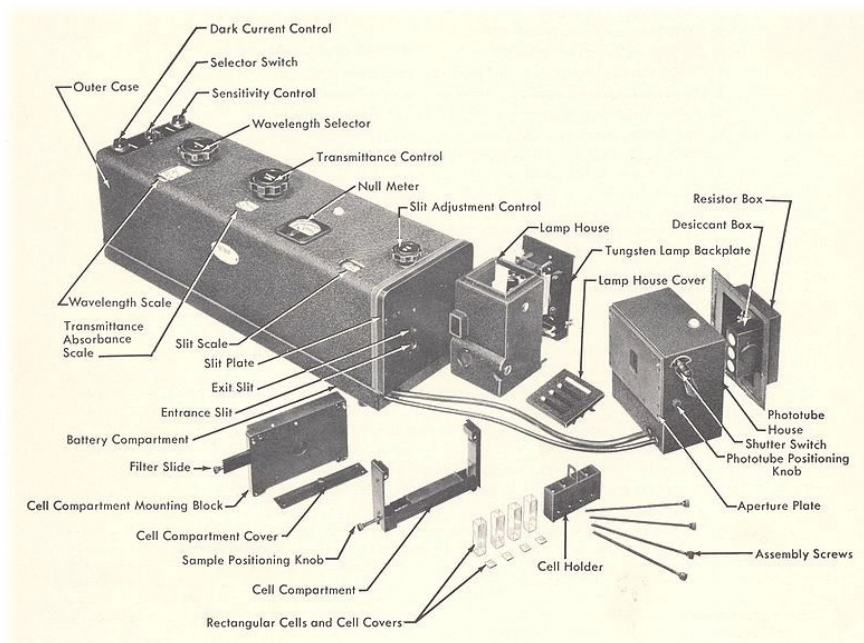
Publicidad del espectrógrafo Hilger.



Fuente de corriente del espectrógrafo.

(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

El espectrofotómetro era UV-visible y de marca Beckmann, modelo DU.



El espectrofotómetro marca Beckmann, modelo DU. Imagen tomada del manual.

Con sus accesorios podían tomarse espectros de absorción, de reflectancia y de emisión (excitados por llama de acetileno). El registro del espectro era punto por punto en forma manual (no tenía escaneado automático de frecuencias).

Entre los documentos pueden verse varias fotografías de ambos instrumentos {[Doc.1](#)}.

Tomás Hirschfeld, Tomás Bense y Germán Krebs fuimos asistentes de la Sección Espectroquímica en distintas etapas. Se realizaban numerosos trabajos de análisis, asesoramiento e investigación. Hay algunos trabajos de espectroquímica de esa época que pueden verse en Internet [[Ref.3](#)].

Hirschfeld emigró con una beca a Estados Unidos donde falleció a los 46 años. Allí se convirtió en una figura relevante de la espectroscopía, tanto que hay un premio anual que lleva su nombre: el *Tomás Hirschfeld Award* [[Ref.4](#)] como se menciona en [[Ref.2](#)]. Dejó más de cien patentes y alrededor de doscientos trabajos publicados en las mejores revistas.

Bense siempre combinó su actividad en la Facultad con la actividad privada en la industria. En mi caso, después de algún inicio en la espectroquímica, me orienté hacia la química cuántica y los métodos informáticos de cálculo.

(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

1966 – 1974 - De la espectroquímica a la química cuántica y la informática

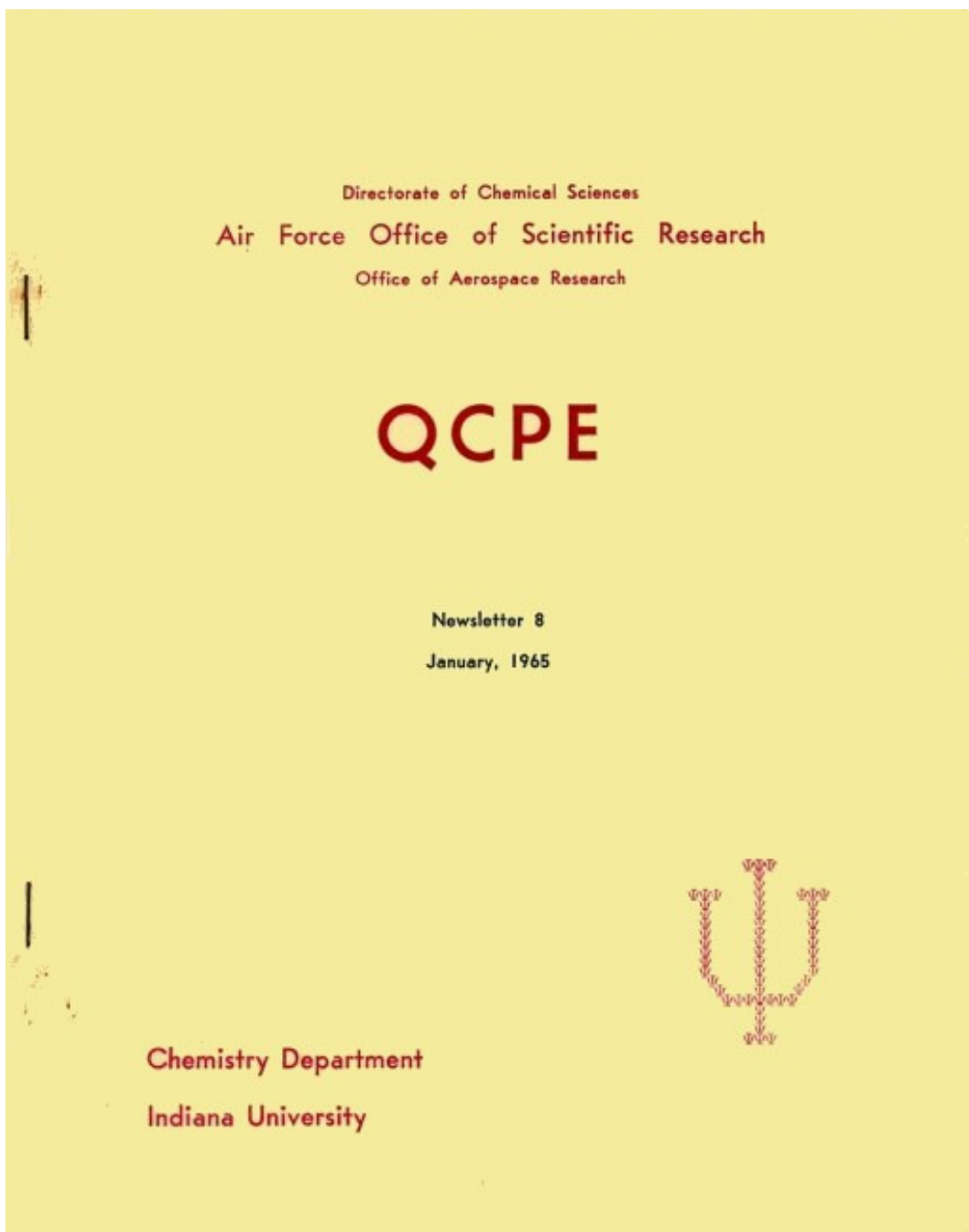
Hasta 1966 el único con formación básica en química cuántica y algo de computación era Sosa. Él había estado en Italia en la década del cincuenta y se vinculó con el grupo de Leonello Paoloni. Con ese grupo comenzó a trabajar en el método de Pariser, Parr y Pople (o PPP) [Ref.5]. Este es un método adecuado solamente para moléculas planas, ya que incluye solo los electrones π . Como fruto de su trabajo con Paoloni se publicó un artículo en 1969 [Ref.5].

En el período que describe esta crónica confluyen diversas circunstancias que catalizan el comienzo de algunas actividades en la Facultad.

Ramón Carbó, un científico catalán estuvo invitado y dio algunas clases de mecánica cuántica. La mayoría de los interesados sabíamos de la importancia del tema para la comprensión de los mecanismos a nivel molecular. Nos encontramos con un panorama más complejo de lo que esperábamos. Fue así que se armaron grupos informales con algunos docentes para avanzar en el tema. Sosa era el único que nos podía orientar. Así entramos en contacto con algunos textos clásicos [Ref. 6].

Para efectuar cálculos de química cuántica era necesario disponer de medios de computación. En 1966 Sólo disponíamos de una calculadora electrónica de mesa marca Frieden con 4 memorias y 30 pasos de programa. Era imposible encarar ningún trabajo.

Es difícil hoy en día imaginarse la falta de recursos en ese momento. Para ubicarse debemos mencionar que no existía Internet ni correo electrónico. Nos enterábamos de las novedades en la biblioteca en el Chemical Abstracts o por el boletín gratuito (que venía por correo postal) del Quantum Chemistry Program Exchange (PCPE).



Accedíamos a algunas *reprint* de trabajos en revistas gracias a la generosidad de algunos autores y colegas en el extranjero. Obtener fondos y comprar publicaciones o programas era una aventura de final abierto.

Citando textual de [\[Ref.1\]](#):

“En esas condiciones de carencia de recursos, que se han mantenido así en la mayor parte del siglo XX, las iniciativas personales de algunos investigadores líderes han sido, históricamente, determinantes para el desarrollo de la actividad científico-tecnológica. Como resultado, muchos programas de investigación

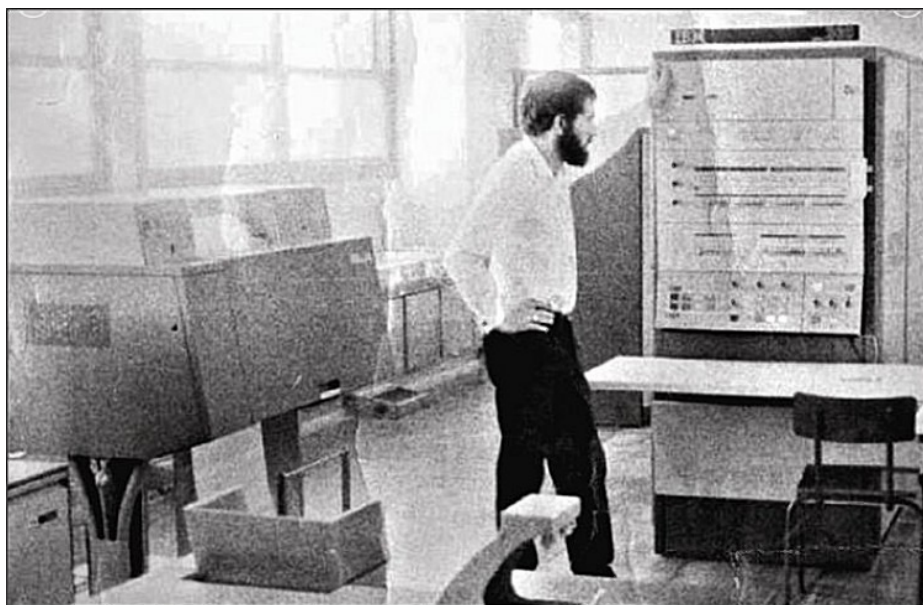
(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

podieron llevarse adelante únicamente por la contracción al trabajo y el carisma de estos científicos.”

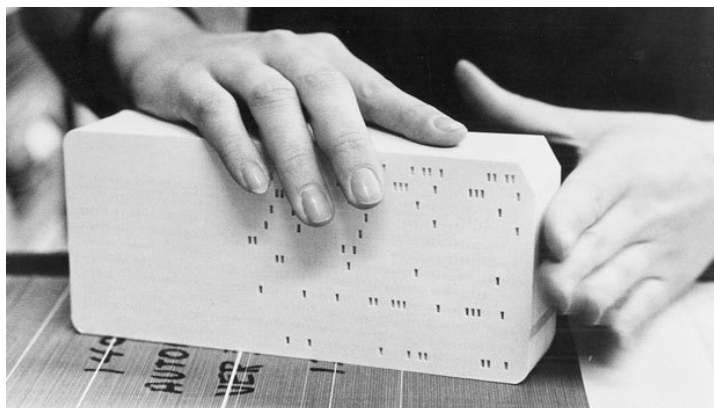
En 1967 la situación cambió sustancialmente con la noticia de que la Universidad recibiría una computadora científica de última generación.

Ese año comencé algunos estudios formales de computación con los docentes de la incipiente carrera de Computador Científico {Doc.2} que se dictaba en el recientemente creado Centro de Cómputos de la Universidad de la República (CCUR), con el asesoramiento de Manuel Sadosky, exiliado de la Argentina por la dictadura de Onganía, en la tristemente célebre “Noche de los bastones largos”.

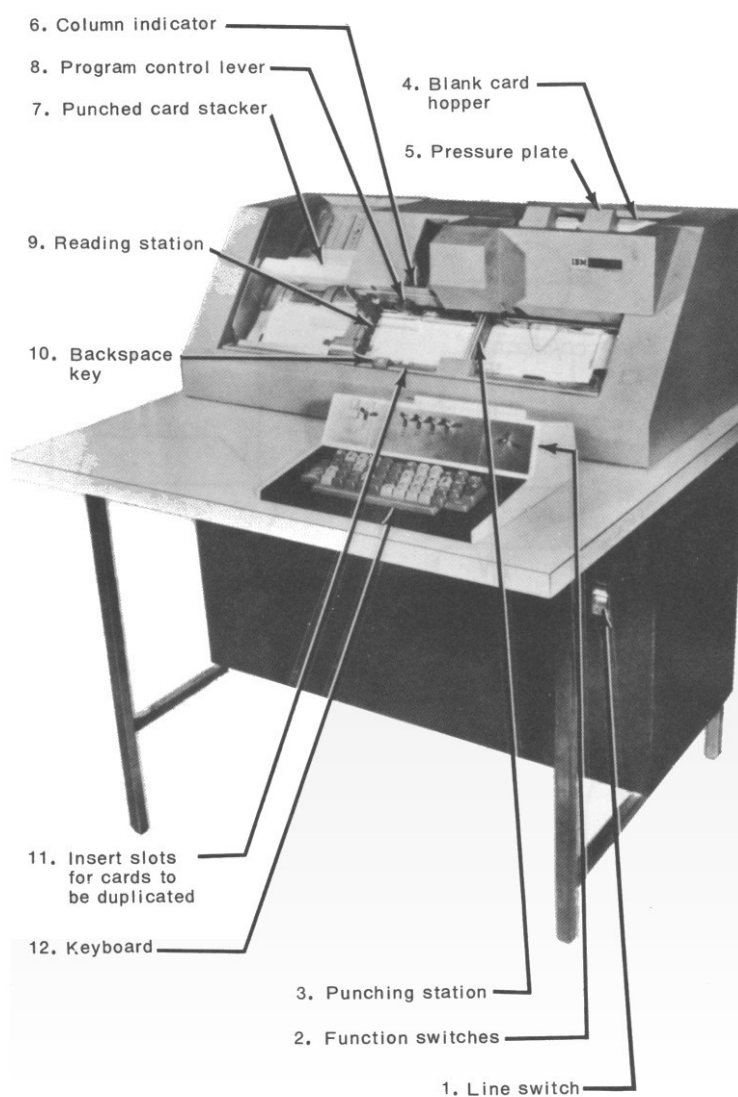
El CCUR recibió un equipamiento líder en materia de cálculo científico. Se trataba de un sistema IBM 360/44. En 1968 solo había tres equipos similares en Sudamérica: en el Instituto Balseiro en Bariloche, otro en San Pablo y este de Montevideo.



El equipo IBM 360/44 del CCUR con su joven operador Gastón Gonnet, quien luego fuera clave en el desarrollo del software *Maple* e hizo carrera en las universidades de Waterloo (Canadá) y Zurich (Suiza). En 2013 recibió un doctorado *honoris causa* de la UdelaR.



Tarjetas perforadas de 80 columnas.



La perfoverificadora IBM 029. Imagen tomada del manual.

A partir de ahí, con la orientación de Sosa, comencé a desarrollar una serie de programas que formaban parte de un sistema para el cálculo por el método AVE-SCF-LCAO-MO (All Valence Electrons - Self Consistent Field - Linear Combination of Atomic Orbitals - Molecular Orbitals) en el lenguaje Fortran de programación.

Nuestro sistema utilizaba todos los electrones de la capa de valencia para los elementos C, N, O, H, F. Estos métodos nacen con las ecuaciones de Roothaan [[Ref.7](#)], aproximando algunos parámetros en forma semiempírica. Los métodos que involucramos en nuestros programas fueron el CNDO/2, el CNDO/S y el INDO [[Ref.8](#)].

El sistema admitía moléculas de hasta 40 átomos y/o 60 orbitales. El ingreso de los programas y los datos a la computadora se hacía con tarjetas perforadas de 80 columnas. El sistema tenía aproximadamente unas tres mil instrucciones (tres mil tarjetas). El listado correspondiente abarca unas cincuenta páginas de instrucciones.

Pasamos a ser usuarios importante del CCUR Como se muestra en el boletín del CCUR de la época, nuestro laboratorio consumía el 5% del total de horas de consumo universitario del CCUR y más del 80% del consumo de nuestra Facultad {[Doc.3](#)}.

Un avance para nuestro sector fue la adquisición de una perforadora de tarjetas IBM 029, que nos independizó de sacar turnos en la sala de equipos de perforación en el CCUR, que estaba en el edificio de la Facultad de Ingeniería. Los resultados que se obtenían eran cargas electrónicas, momentos dipolares, energía del estado fundamental, energías de estados excitados, potenciales de ionización, posiciones preferenciales para las sustituciones nucleofílicas y electrofílicas. Además con el cálculo de energías de transición y fuerzas de oscilador podíamos comparar con los espectros UV-visible experimentales.

A continuación se muestran tarjetas con indicaciones manuscritas que hice como ayuda memoria, que indicaban la ubicación de los datos y las distintas parametrizaciones en las tarjetas perforadas.

(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

CNDO-EHT-DBJ
1ª TARJETA

TITULO

IMPR1 ≠ 0 no salta página, no imprime tipo de cálculo, ZN, NELEC, NORBIT.

ERROR ≠ 0 imprime matrices de transformación de coordenadas.

NCOMEN = no. de tarjetas de comentarios a intercalar después de la 2ª tarjeta.

CNDO-EHT-DBJ
2ª TARJETA

PARAMETROS y OPCIONES

NATOM	CONV	NCONF	NBTETA	NITER	LIMIT	IZEFF	NZEFF	IORDEN	IREP	IMPR5	IEXREP	IJAUV	ISENE
-------	------	-------	--------	-------	-------	-------	-------	--------	------	-------	--------	-------	-------

NATOM no. de átomos.

CONV criterio de convergencia.

IPARAM = 1 SYW ← DB (CNDO/2) ← EHT ← PYS (CNDO/4)

NCONF no. de configur. en C.I.

IARCH no. de subarchivo (≤ 4).

IZEFF ≠ 0 se leen las Zeff.

NZEFF # 0 de Zeff a leer.

IORDEN ≠ 0 coord. C y IP por AO (S, P, etc.)

IREP actua cuando IPARAM ≠ 1

IMPR5 ≠ 0 no imprime ECI, IP, H, cargas.

IEXREP ≠ 0 se leen YAA

IJAUV lee (JA)/Z ; IJAUV = 2 lee U

IMPR2 ≠ 0 no imprime XYZ

IMPR3 = 0 " " " S, V, U, GAMMA, BETA

IMPR4 = 0 " " " vectores propios (MO)

NBETA no. de β a leer.

NITER no. máximo de iteraciones.

LIMIT límite de tiempo en minutos.

2ª TARJETA: ver al dorso.

Después de la 2ª tarjeta, van tarjetas de comentarios en cantidad igual a NCOMEN.

Luego tarjeta(s) con los números atómicos, formato 20(I2,2X).

Después las coordenadas (X(I), Y(I), Z(I), I=1, NATOM) con formato 8F10.

Tarjeta con indicaciones de esa época, manuscritas por el autor de esta crónica, que indicaban la ubicación de los datos y las distintas parametrizaciones.

A continuación también se muestra el encabezado de la primera página del listado fuente del sistema [Ref.9], de unas 3.000 sentencias en Fortran, que desarrollé bajo la supervisión de Sosa a partir de 1969 y que se utilizó en todos los trabajos que encaramos hasta mi alejamiento en 1974.

(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

```

AVE SCF MO

FACULTAD DE QUIMICA - LABORATORIO DE QUIMICA CUANTICA
RAMON SOSA - GERMAN KREBS (1971)

*****
*
* PROGRAMA AVE-SCF-MO CNDO (ESTADO FUNDAMENTAL) (LISTADO SIN COMPILAR)
*
* VERSION DE 60 ORBITALES - 40 CENTROS , CON USO DE ARCHIVO DE DISCO
*****

//QEMACANA JOB ,T=030,H=060
//PROG11 EXEC FORTRAN(NOSOURCE)
C PROGRAM PARA LLAMAR A PROGR1
INTEGER ZN,ZC,T1
DIMENSION ZN(40),ZC(40),X(40),Y(40),Z(40),MUMIN(40),MUMAX(40),
*U(60),ZETA(40),E(60)
COMMON/FACTOR/HARTRE,BOHR
BOHR=0.5293
HARTRE=27.21
COMMON/VECT/ZN,ZC,X,Y,Z,MUMIN,MUMAX,U,ZETA,E
COMMON/DIMENS/IA,IE
IA=40
IE=60
CALL PROGR1(ZN,ZC,X,Y,Z,MUMIN,MUMAX,U,ZETA,E)
END

/*
//PROG21 EXEC FORTRAN(NOSOURCE)
C PROGRAM PARA LLAMAR A PROGR2
INTEGER ZN,ZC,T1
DIMENSION BETA(40,40),GAMMA(40,40)
DIMENSION ZN(40),ZC(40),X(40),Y(40),Z(40),MUMIN(40),MUMAX(40),
*U(60),ZETA(40),E(60)
COMMON/MATR/BETA,GAMMA
COMMON/VECT/ZN,ZC,X,Y,Z,MUMIN,MUMAX,U,ZETA,E
COMMON/DIMENS/IA,IE
CALL PROGR2(ZN,ZC,X,Y,Z,MUMIN,MUMAX,U,ZETA,E,BETA,GAMMA,IA)
END

```

Facsímil del encabezado del sistema AVE-SCF-MO semiempírico que programé en 1969-71 bajo la supervisión de Sosa.

Con este sistema se realizaron varios proyectos. Los primeros tres trabajos presentados públicamente [Ref.10] y hechos íntegramente con el sistema de programas desarrollado por nosotros aparecieron en 1972 en el XI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) en 1972. Se muestran en el Apéndice las notas de admisión de los trabajos a dicho Congreso [Doc.6].

En la página 9 de uno de estos trabajos (“Estructura electrónica del benzofurazano y derivados – Estado fundamental” [Ref.10]) se testimonia que “los programas de calculo para

(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

los métodos EHT y CNDO se desarrollaron totalmente en nuestro laboratorio” {Doc.4} y {Doc.6}. El párrafo extraído se muestra a continuación.

Cálculos efectuados.

Todos los cálculos han sido efectuados con la computadora IBM/360 modelo 44G (132K) con memoria auxiliar de disco con 1170K, del Centro de Computación de la Universidad de la República.

El programa de cálculo por el método de PPP fué desarrollado en nuestro laboratorio tomando como base uno desarrollado por Lykos en el Quantum Chemistry Laboratory del Illinois Institute of Technology el cual se complementó agregándole el cálculo de intensidades de oscilador; el programa funciona en forma totalmente automática, dando solo como datos la geometría molecular y parámetros relativos a los centros que componen la molécula.

En lo relativo a los programas de cálculo para los métodos EHT y CNDO se desarrollaron totalmente en nuestro laboratorio.

Aún hay vestigios de estos trabajos en Internet. Buscando en “Google Books” encontramos en la dirección

<https://books.google.com.ar/books?id=ryvVAAAAMAAJ&q=krebs+benzofurazano+chile&q=krebs+benzofurazano+chile> lo siguiente:

The screenshot shows a Google Books search result for the query "benzofuroxano sosa krebs". The search results page displays the book "Boletín de la Sociedad Chilena de Química, Volúmenes 16-18" by the Sociedad Chilena de Química, published in 1970. The book has a 5-star rating and 0 opinions. The search results also show a snippet of the book's content, which includes the title "ESTRUCTURA ELECTRONICA DEL BENZOFURAZANO Y ALGUNOS DERIVADOS. II. ESPECTROS ELECTRONICOS." and the authors "SOSA R. y KREBS, G.". The snippet also mentions the institution "Sección Química Cuántica y Espectroquímica" and the direction "Facultad de Química- Universidad de la República".

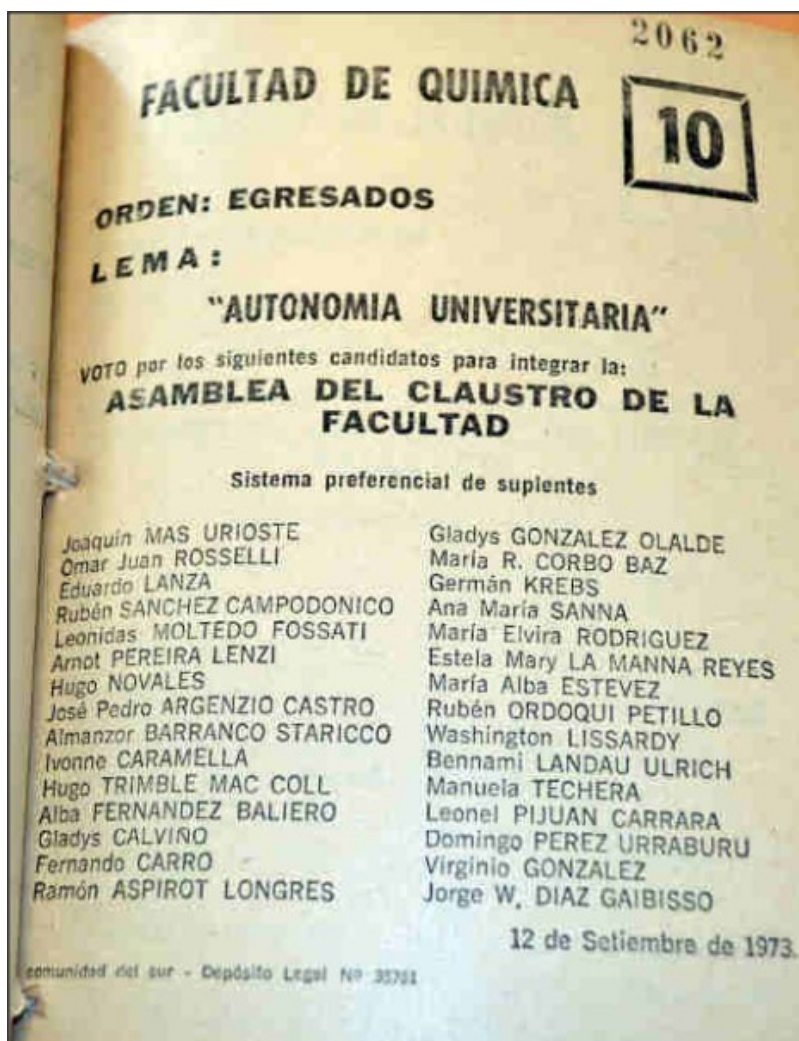
A raíz de nuestra participación en dicho congreso fuimos invitados a participar de la creación de un Centro Latinoamericano de Química Teórica {Doc.5}.

En la misma época comienzan a dictarse cursos de química cuántica por Sosa y Krebs {Doc.7}. A continuación se muestra un párrafo extractado del {Doc.7}.

Los cursillos I, II, y III estarán a cargo del suscrito y del Asistente Interino de Química Cuántica Prof. Germán Krebs. El Cursillo IV estará a cargo del Asistente Interino de Espectroquímica Prof. Tomás Bense en colaboración con el Ayudante Honorario de esta Sección Bach. Oscar Giordano.
Sin otro particular saludo a Ud. muy atte,
(fdo.) Prof. Ramón Sosa
Jefe de Sec. Quím. Cuántica y Espectroq.

Contexto político

En 1973 se produce el golpe de estado. Los que teníamos actividad gremial y/o política nos vimos muy complicados. En mi caso era delegado docente a la Federación de Docentes Universitarios y candidato, ese año, al Claustro de la Facultad por el Orden Egresados. Con la intervención la actividad gremial se tornó riesgosa.



(* Nota: Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

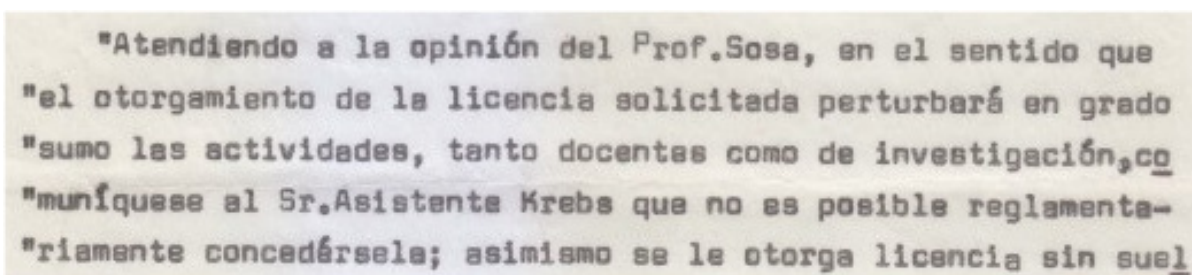
El resultado de las elecciones universitarias fue desconocido y se produjo la intervención de la Universidad por parte de la dictadura.

Hacia 1974 la situación se me hizo insostenible y solicité una licencia sin goce de sueldo, para esperar la evolución de los hechos, a buen resguardo, en Buenos Aires. La licencia me fue denegada {[Doc. 9](#)}.

Colofón

Este fue un breve resumen del nacimiento de la química cuántica y la informática química en el Uruguay y de mi participación en esa etapa. Me fui en 1974, como tantos, por razones políticas. A pesar de mi juventud, en aquella época formé parte de los inicios de esta aventura científica.

El único reconocimiento a mi participación lo obtuve, curiosamente, de la intervención durante la dictadura. El interventor, en la nota en que comunica la negativa a la licencia, incluye la frase {[Doc.8](#)}:



"Atendiendo a la opinión del Prof.Sosa, en el sentido que
"el otorgamiento de la licencia solicitada perturbará en grado
"sumo las actividades, tanto docentes como de investigación, co
"muníquese al Sr.Asistente Krebs que no es posible reglamenta-
"riamente concedérsela; asimismo se le otorga licencia sin suel

que constituye una gran ironía.

Debo un agradecimiento público a las autoridades de la Facultad que en 1985, en el decanato de Carlos Piriz MacColl, me ofrecieron retomar mi cargo {[Doc.10](#)}, por reconocer que mi alejamiento fue forzado. Mi retorno no se pudo concretar por motivos personales. Doce años después, mi vida había tomado otros rumbos.

Como se expresa en [[Ref.1](#)]:

“Luego de 1985 se ha producido un cierto despegue de las actividades científico-tecnológicas, apoyado en gran parte por ayuda financiera internacional obtenida a través de algunas acciones colectivas por parte de la comunidad académica.”

“A pesar de estos relevantes cambios producidos en las últimas dos décadas, resulta de sumo interés analizar momentos clave de etapas anteriores a la

dictadura militar, en las cuales la marca personal de los mencionados investigadores líderes fuera relativamente mayor.”

Los años siguientes en la Facultad vieron la aparición de nuevos protagonistas en estas temáticas. El hilo conductor entre una y otra época pasaría por Ramón Sosa, como precursor y propulsor. En la década siguiente una nueva generación, con el fuerte impulso de Oscar N. Ventura quien tomaría vigorosamente la posta.

Finalmente unas palabras sobre un hecho penoso que, en su momento, me provocó una gran desilusión. En 1977 un colega me cuenta que apareció un trabajo de Sosa en los Anales de la Facultad de Química que utilizaba parte del trabajo que habíamos hecho juntos, pero sin mencionarme.. Durante un tiempo, olvidé el tema, ya que seguíamos en dictadura. En 1985 reviso los artículos y mis viejos apuntes. Veo que hay utilización de datos de trabajos en los que participé. No hay mención a mi persona. Ya en democracia, hago llegar mi reclamo y el Consejo designa una Comisión {[Doc.10](#)} para analizar lo que denominaron “el diferendo Sosa-Krebs”. Envié la información que me solicitó la Comisión y esperé en vano. Jamás se volvieron a comunicar. Haciendo balance veo que, tal vez por las presiones, no me podían mencionar durante la intervención. Pero pensé que tendría un reconocimiento en democracia. Lo que me asombró es que se dejó morir el reclamo que hice. Supe, años después, que con mi informe en la mano pero sin mencionarlo públicamente, no habían renovado el cargo del Prof. Sosa. Esto lleva implícito el reconocimiento de la validez de mi reclamo. Hubiera deseado que Sosa conserve el cargo y se reconociera públicamente el error. Lamentablemente “quedó bajo la alfombra”.

Sin ningún ánimo de reavivar los aspectos conflictivos, que han perdido vigencia, he tratado de rescatar lo anecdótico, que forma parte de uno de los tantos episodios que van jalonando la historia de la política universitaria y la mía personal.

Entiendo que hice un relato objetivo, ceñido a los hechos, pero no imparcial, ya que está impregnado por el recuerdo de las vivencias de la época y mi visión personal.

Referencias

Los enlaces que comienzan con “<https://riquim.fq.edu.uy/>” corresponden al Repositorio Institucional de la Facultad de Química (RIQUIM).

Ref.1

“Creación del Instituto de Química, Historia de la Facultad de Química, Universidad de la República” (1915),

<http://riquim.fq.edu.uy/archive/files/3182993fde53496215950be85eef566e.pdf>

Ref.2

“Giovanni Battista Marini Bettolo: su incidencia en el desarrollo de la química en Uruguay”,

Patrick Moyna y otros, www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0104-59702005000200019

Ref.3

[1968 - Construcción y uso de un accesorio de reflexión total atenuada para el espectrofotómetro Beckman DU](http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6339), G. Krebs, Facultad de Química. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6339>

[1967 - Determinación de sodio, potasio y calcio en muestras de feldespatos del orden del miligramo. 1\) Por espectrofotometría de llama. 2\) Por espectrografía de arco](http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6343), G. Krebs, Facultad de Química. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6343>

Ref.4

“Tomas Hirschfeld Award” <https://icnirs.org/tomas-hirschfeld-award/>

Ref.5

R. Pariser and R. Parr, Journal of Chemical Physics, 21, 466, (1953)

R. Pariser and R. Parr, Journal of Chemical Physics, 21, 767 (1953)

J. A. Pople, Transactions of the Faraday Society, 49, 1375, (1953)

“The electronic structure of groups of isomeric hetero-aromatic systems : II—The Spectra and the structure of the N-oxides of benzofurazan”, L. Paoloni y R. Sosa, Tetrahedron. Vol. 25, pp. 4197 to 4205, 1969.

<http://riquim.fq.edu.uy/archive/files/c25d00d6cb275e928c10c3e792497039.pdf>

Ref.6

“Quantum Chemistry” H. Eyring, J. Walter y G. E. Kimball, Wiley (1944).

“Introduction to Quantum Mechanics”, L. Pauling y E. B. Wilson, McGraw-Hill (1935).

“Molecular Orbital Theory” C. J. Ballhausen y H. B. Gray, Benjamin (1965).

Ref.7

“The Quantum Theory of Molecular Electronic Structure” R. G. Parr, Benjamin (1963).

Roothaan, C. C. J. (1951). "New Developments in Molecular Orbital Theory". Reviews of Modern Physics. 23 (2): 69–89.

Ref.8

“Approximate Molecular Orbital Theory”, J. A. Pople y D. L. Beveridge, McGraw-Hill (1970).

Ref.9

1971 - Listado Fortran de un sistema AVE-SCF-MO (CNDO) en:

[https://www.academia.edu/51298851/1971 Listado Fortran de un sistema AVE SCF MO CNDO](https://www.academia.edu/51298851/1971_Listado_Fortran_de_un_sistema_AVE_SCF_MO_CNDO)

Previamente realicé diversos programas de base o apoyo a nuestros trabajos, que se pueden ver en un repositorio en Internet:

- 1971 - Programa para mejorar resolución de espectros con el plotter del Centro de Cómputos del CCUR. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6347>
- 1971 - Programa para la representación 3D con el plotter del Centro de Cómputos del CCUR . También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6345>
- 1970 - Gráficos de densidad electrónica molecular pi. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6346>
- 1970 - Cálculo de coordenadas y distancias en moléculas 3D. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6344>
- 1969 - Programa en Fortran para el estudio de moléculas por el método LCAO simple (Método de Hückel). También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6341>
- 1969 - Calculo de coordenadas y distancias en moléculas planas -Teoría y programa en Fortran. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6340>
- 1969 - (I) Regresión y correlación lineal (II) Regresión cuadrática -Programación en Fortran IV. También en <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6342>

Ref.10 Tres trabajos presentados al XI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) en 1972:

1972 - Estructura electrónica del benzofurazano y algunos derivados – espectros electrónicos.

1972 - Estructura electrónica del benzofurazano y algunos derivados – estado fundamental

1972 - Estudio mecánico-cuántico de algunos equilibrios cetona-énol.

También en los siguientes enlaces del RIQUIM:

<http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6349>

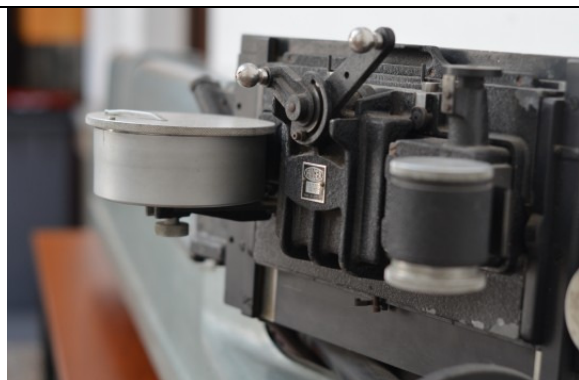
<http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6350>

<http://riquim.fq.edu.uy/items/show/6348>

Consultas web realizadas el 15/04/2022.

Apéndice - Documentos

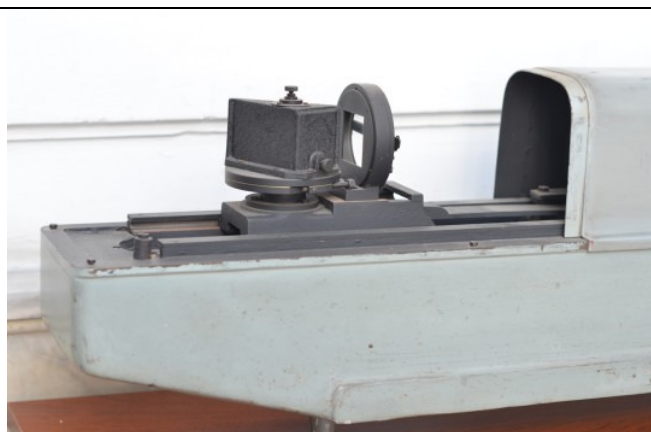
Doc.1. Fotografías proporcionadas actualmente por el profesor Enrique Pandolfi, de la Sala Museo de la Facultad. (Citado en Pág. 3)



Accesorio para rollo fotográfico del espectrógrafo Hilger.



Vista de conjunto del espectrógrafo Hilger.



Montura del prisma del espectrógrafo Hilger.



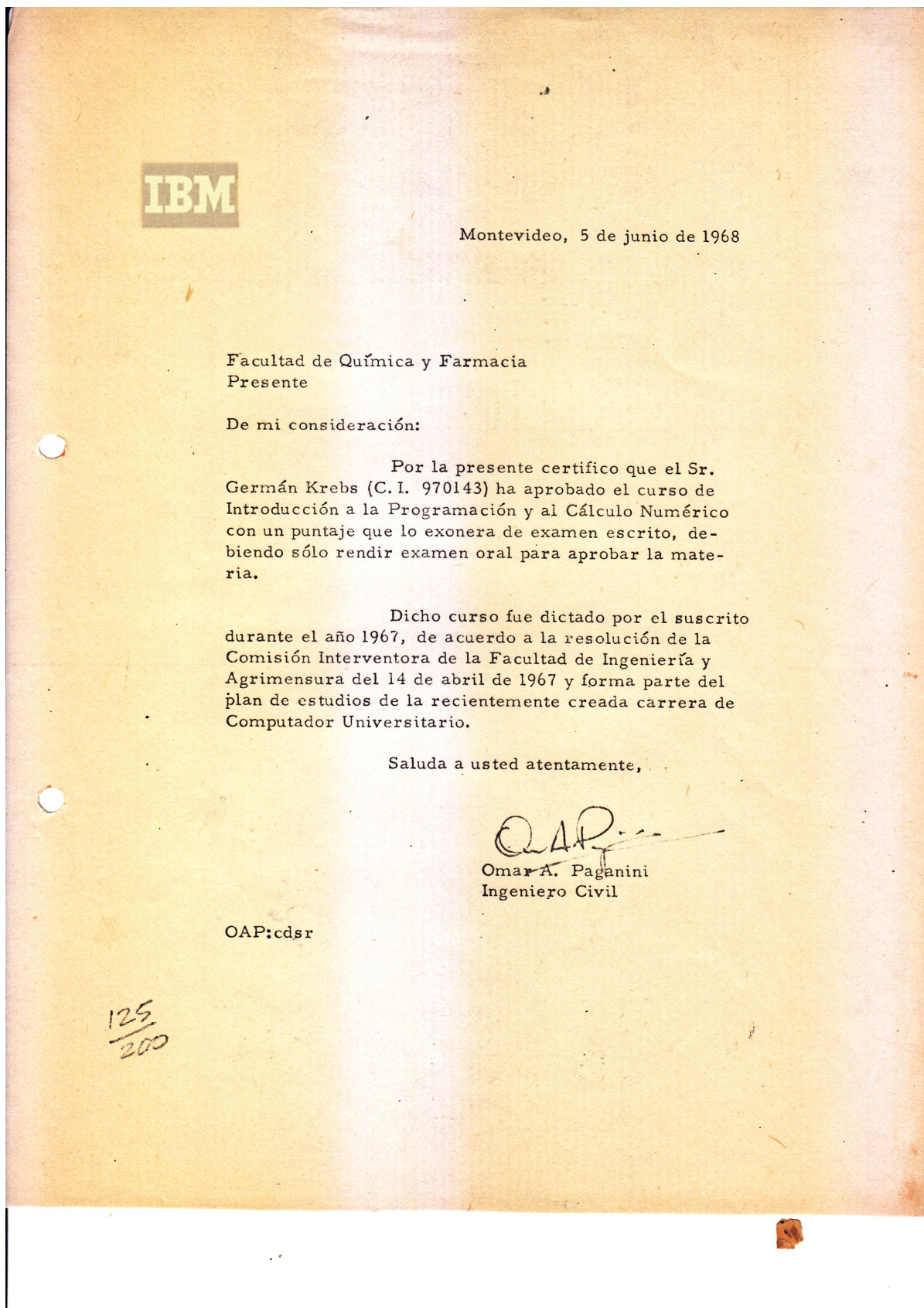
Montura del prisma del espectrógrafo Hilger.



Espectrofotómetro Beckmann DU UV-Vis.



Ídem. Detalle de los controles.

Doc.2 Curso de programación y cálculo numérico que aprobé (Citado en Pág. 6)

Doc.3 Boletín del CCUR (Citado en Pág. 8)


(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

Página 19 del Boletín del CCUR (Citado en Pág. 8)

-19-

USO DE LA COMPUTADORA DESDE JULIO A DICIEMBRE DE 1970				
	Hs.	Minutos	Hs.	Min.
INSTITUTO ALBERTO BOERGER	9	19.23		
INSTITUTO NACIONAL DE COLONIZACION	3	34.58		
ADM. OBRAS SANITARIAS DEL ESTADO	9	1.80		
OFIC. DE PLANEAMIENTO Y PRESUPUESTO	2	59.23		
ADM. USINAS Y TELEFONOS DEL ESTADO	11	58.05		
COM. TECNICA MIXTA LAGUNA MERIN	1	35.93		
ESTADISTICAS Y CENSOS	10	...		
TOTAL USUARIOS NO UNIVERSITARIOS			48	44.00
=====				
AGRONOMIA - BIOESTADISTICA	2	36.38	2	36.38
CENTRO - CONTABILIDAD	18	34.50		
CENTRO - DEMOSTRACIONES	5	57.63		
CENTRO - INVESTIGACIONES	5	47.77		
CENTRO - DESARROLLO MULTIACCESO	1	33.27		
CENTRO - ANALISIS DE PROGRAMAS	42	34.32	75	27.49
DERECHO - INST. CIENCIAS SOCIALES	5	35.85	5	35.85
HUMANIDADES - ASTRONOMIA	3	48.48		
HUMANIDADES - LINGUISTICA	4	53.20	8	41.68
INGENIERIA - INST. AGRIMENSURA	5	59.97		
INGENIERIA - INST. ING. CIVIL	0	29.43		
INGENIERIA - INST. ING. ELECTRICA	0	44.78		
INGENIERIA - INST. FISICA	93	38.86		
INGENIERIA - INST. ING. MECANICA	24	7.03		
INGENIERIA - OPCIONAL PROGRAMACION	4	23.20		
INGENIERIA - TALLER CICLO BASICO	3	36.63	132	59.90
MEDICINA - ANATOMIA PATOLOGICA	1	21.87		
MEDICINA - BIOFISICA	0	21.05		
MEDICINA - CICLO BASICO	0	38.78		
MEDICINA - CLIN. GINECOTOLOGICA	3	35.80		
MEDICINA - HIGIENE	0	14.50		
MEDICINA - NEUROFISIOLOGIA	0	3.05		
MEDICINA - PATOLOGIA Y FISIOPATOL.	18	40.07		
MEDICINA - BIOQUIMICA	0	0.45	24	55.57
C. ECONOMICAS - INST. ADMINISTRAC.	0	3.67		
C. ECONOMICAS - INST. ECONOMIA	17	33.20		
C. ECONOMICAS - INST. ESTADISTICA	43	12.58	60	49.45
COMPUTACION - SIST. PROC. DATOS	5	9.08		
COMPUTACION - INTR. CALC. NUM. Y PROG.	1	45.93		
COMPUTACION - OPCIONALES	2	49.93		
COMPUTACION - PROGRAMACION	1	33.68		
COMPUTACION - SEMINARIO COMPUTACION	33	51.62	45	09.24
QUIMICA - ESPECTROQUIMICA	20	37.10		
QUIMICA - MATEMATICAS	4	26.70		
QUIMICA - PROCESOS UNITARIOS	0	56.48	25	00.28
ARQUITECTURA - INST. CLIMATOLOGIA	2	23.53		
ARQUITECTURA - INST. CONSTRUCCION	7	10.76		
ARQUITECTURA - INST. URBANISMO	0	4.05	9	38.34
HOSP. CLINICAS - ADMINISTRACION	8	9.87		
HOSP. CLINICAS - ESTADISTICA	13	23.35	21	33.22
UNIVERSIDAD - BEDELIAS	23	20.77		
UNIVERSIDAD - PLANEAMIENTO	2	39.33		
UNIVERSIDAD - PERSONAL	95	47.05	121	47.15
TOTAL USUARIOS UNIVERSITARIOS			434	14.60
=====				
TOTAL USUARIOS			582	58.55

(*) Nota: Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

Doc.4 Carta invitación al XI Congreso Latinoamericano de Química (Citado en Pág. 11).

XI CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUIMICA
5 AL 11 ENERO 1972 - SANTIAGO DE CHILE

Santiago, 4 de Octubre de 1971.

Doctor
Germán Krebs
Sección Espectroquímica y
Química Cuántica
Montevideo, Uruguay

Estimado doctor Krebs:

Tenemos el gusto de acusar recibo de su atenta misiva con fecha 24 de septiembre de 1971. Nos llenó de honda satisfacción conocer el interés suyo por este nuevo Congreso Latinoamericano de Química.

Adjunto le incluimos el primer boletín informativo y el Reglamento del Congreso; mucho le agradeceríamos tuviera a bien comunicar, a su más pronta conveniencia, a sus colegas de los puntos de mayor urgencia mencionados en los mismos. Simultáneamente, estamos despachando fichas de inscripción y fichas de presentación de trabajos.

Anticipándole las gracias por la atención que nos pueda seguir dispensando, aprovechamos para saludarlo con nuestra más distinguida consideración. De usted, atentamente

COMISION ORGANIZADORA
XI CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUIMICA

Camilo Fernández
SECRETARIO EJECUTIVO

Anexo: Boletín Informativo
Reglamento

CLASIFICADOR 549 - CORREO CENTRAL

CAMPUS UNIVERSIDAD
CATOLICA DE CHILE

Doc.5

Carta invitación al Centro Latinoamericano de Química Cuántica (Citado en Pág. 11).

*Facultad de Ciencias*Físico - Químico - Matemáticas
San Luis
Rep. Argentina

San Luis, 7 de marzo de 1972.

Dres. G. KREBS y R. SOSA
Sección Química Cuántica y Espectroquímica
Facultad de Química -Universidad de la República-
Montevideo-Uruguay

Estimados colegas:

Por el material adjunto se informarán Uds. de las gestiones que se están haciendo para dar nacimiento a un Centro Latinoamericano de Química Cuántica.

Mucho nos interesaría contar con vuestra adhesión y que, además, designaran a una persona de ese grupo para representar al Uruguay en estas tareas previas de organización.

Esta persona estaría en contacto directo con esta Secretaría Provisoria y tendría a su cargo la tarea de reunir los adherentes uruguayos (residentes o en el exterior) que se interesan en la Química Cuántica.

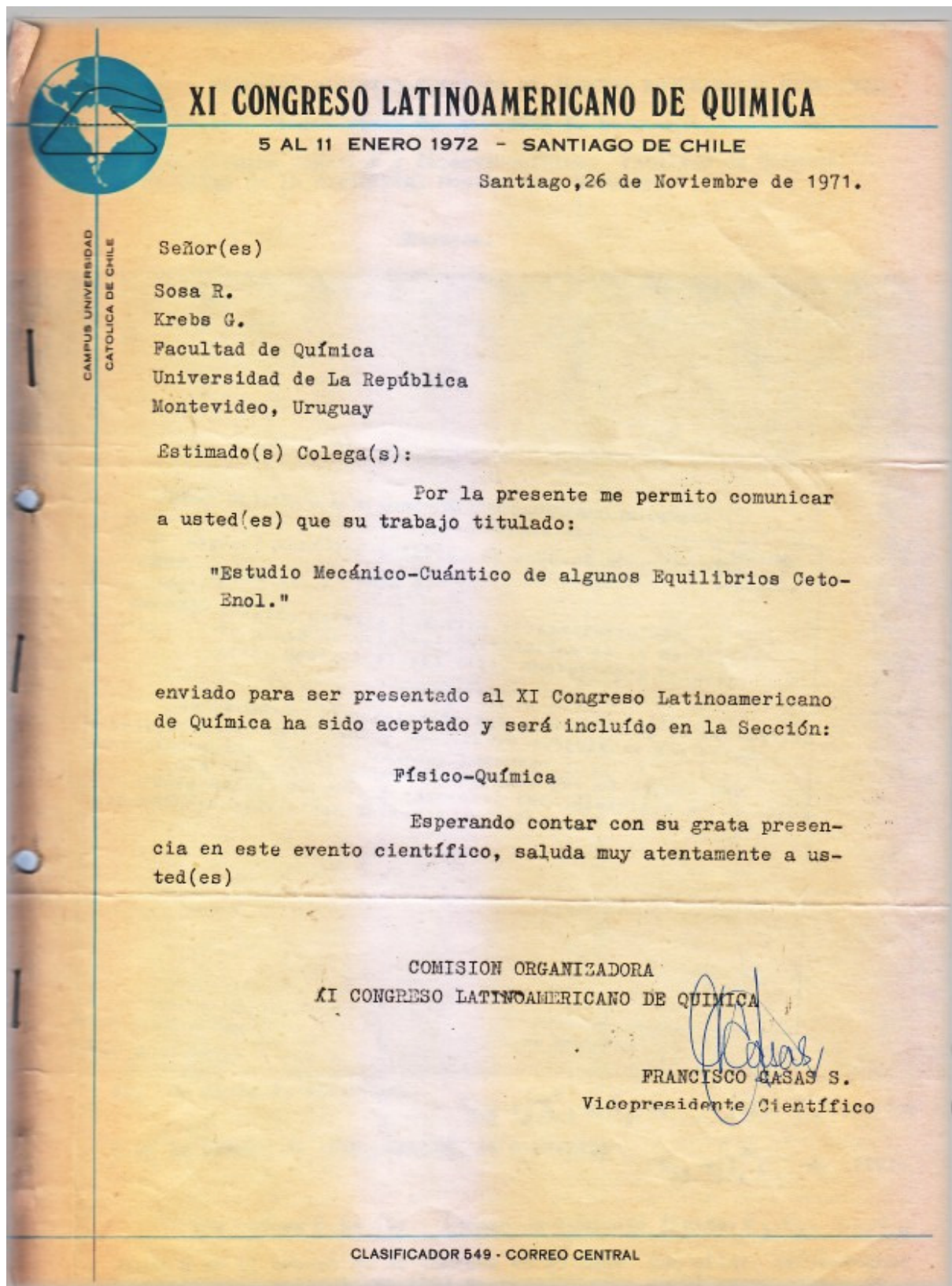
A la espera de vuestras gratas noticias, les saludo muy cordialmente.


Carlos A. Ponce

- Adjunto:
- a) Circular general a profesores e investigadores de Química Cuántica
 - b) Resumen de los fundamentos que apoyan la creación del Centro
 - c) Modelo de Ficha Provisoria de Inscripción
 - d) Cuestionario a ser llenado por cada adherente.

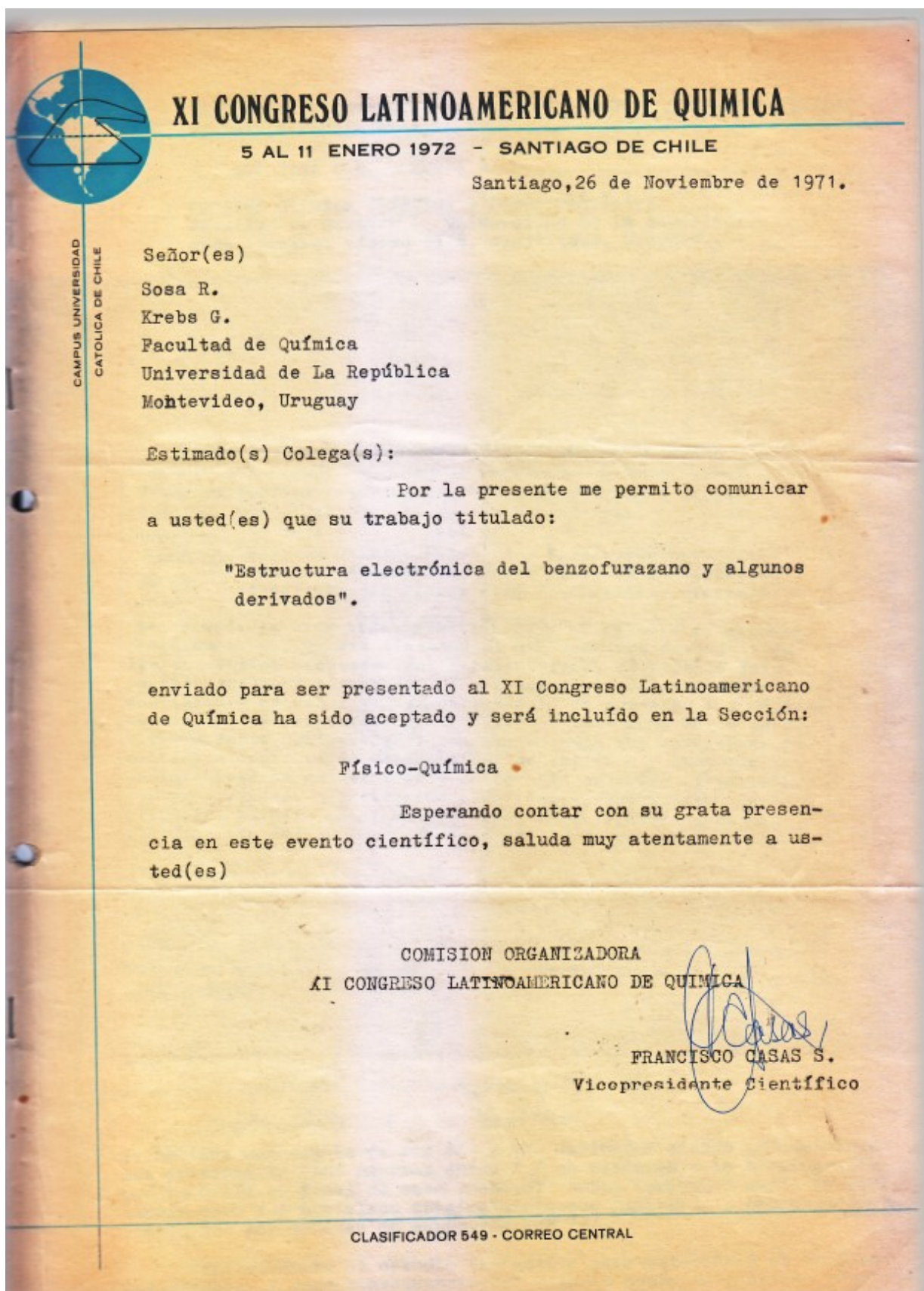
Doc.6

Recepción trabajo enviado al XI Congreso Latinoamericano de Química (Citado en Pág. 10 y 11).



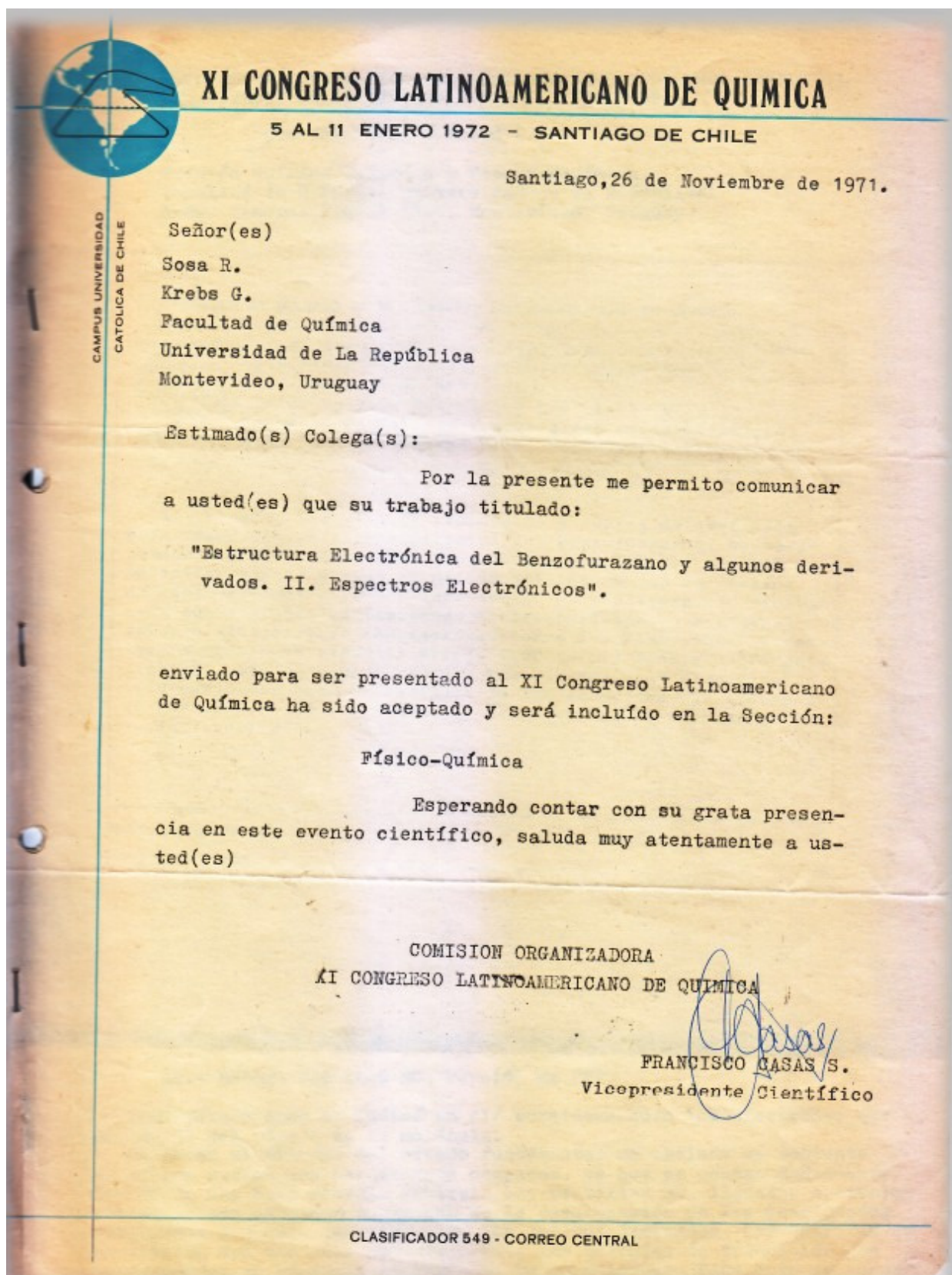
(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

Recepción trabajo enviado al XI Congreso Latinoamericano de Química (Citado en Pág. 10 y 11).



(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

Recepción trabajo enviado al XI Congreso Latinoamericano de Química (Citado en Pág. 10 y 11).



(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

Doc.7 Comunicación de cursillos de química cuántica que dictamos en 1973 (Citado en Pág. 12)

FACULTAD DE QUIMICA.

Repartido Nº 41
EA/atg. Marzo 28/73

CURSILLOS SOBRE QUIMICA CUANTICA Y ESPECTROQUIMICA.

Montevideo, marzo 12 de 1973.

Sr. Decano de la Facultad de Química,
Prof. Carlos Píriz Mac Coll.

De mi mayor consideración:

Por la presente elevo a Ud. la programación de las actividades docentes de la Sección Química Cuántica y Espectroquímica para el presente año a la cual se adjuntan los respectivos programas.

Los cursillos a desarrollar son los cuatro siguientes: I) Cursillo Introductorio a Química Cuántica. II) Cursillo Intermedio de Química Cuántica. III) Seminario de Química Cuántica. IV) Cursillo de Análisis Espectrográfico.

I) Cursillo Introductorio de Química Cuántica.
Duración: 2 meses
Horas semanales: 2 (2 clases semanales de 1 hora 1/2)
Comienzo: 29 de marzo del cte. año
Requisitos: Haber cursado Matemáticas I, II y III o equivalentes

II) Cursillo Intermedio de Química Cuántica.
Duración: 2 meses
Horas semanales: 6 (4 clases sem. de 1 h y 1/2)
Comienzo: Principios de Junio
Requisitos: Haber cursado el Curso Introductorio de Química Cuántica o equivalente.

Este cursillo estará dividido en 4 partes, las cuales se pueden cursar independientemente una de otra y realizadas simultáneamente en grupos de a dos. Dichas partes son: a) Introducción al estudio de Espectros Atómicos, b) Introducción al estudio de Espectros Moleculares (realizadas simultáneamente a razón de 2 clases semanales de 1 h y 1/2 cada una); c) Introducción a la Mecánica y Termodinámica Estadística; d) Introducción a la Estructura Electrónica de los sólidos (Realizadas simultáneamente a razón de 2 clases semanales de 1 h y 1/2 cada una).

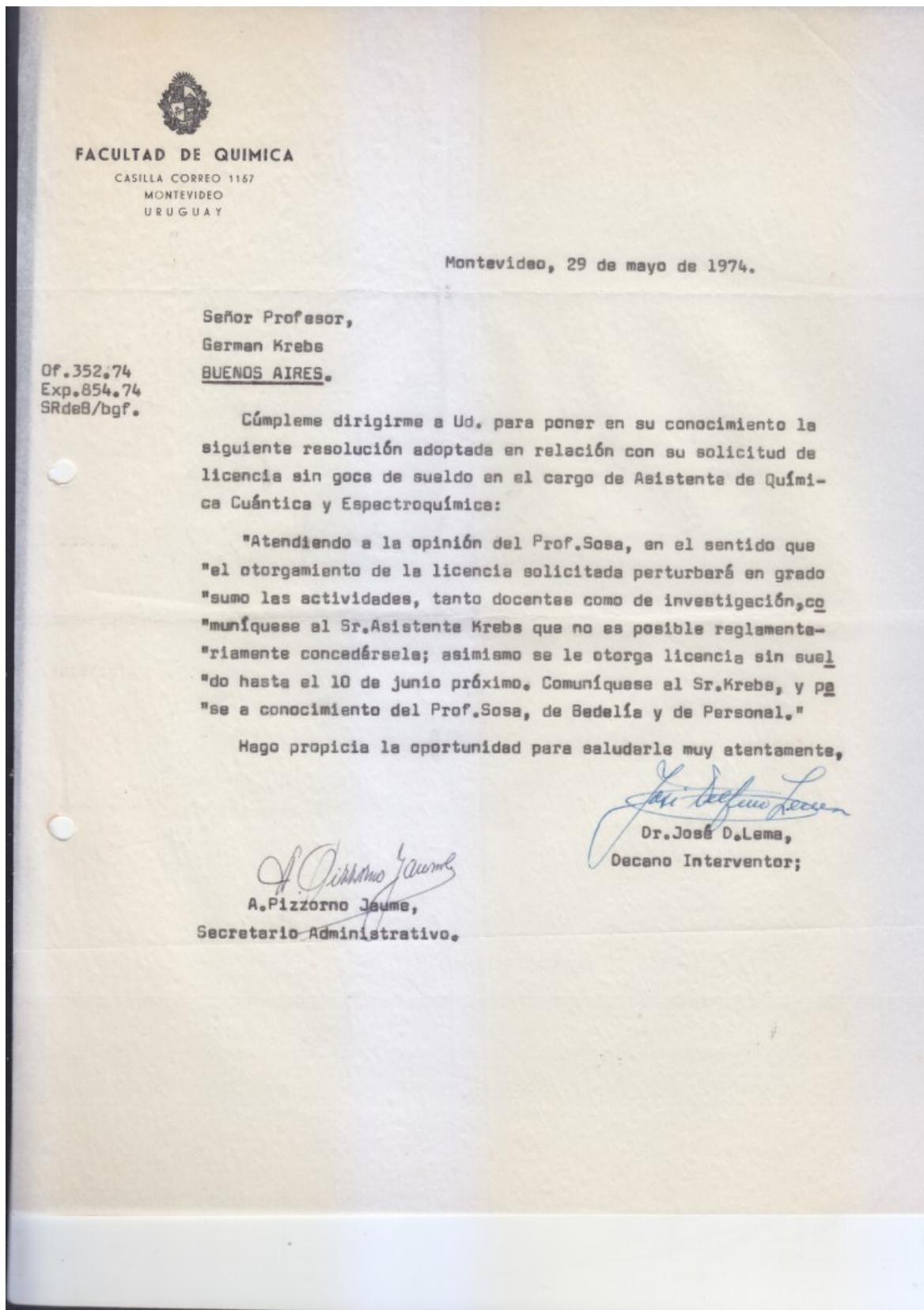
III) Seminario de Química Cuántica
Duración: 4 meses
Horas semanales: 4
Comienzo: Principios de agosto
Requisitos: Ninguno; sin embargo es conveniente haber cursado Análisis Cuantitativo y Óptica y Electricidad de los cursos de Física.

Los cursillos I, II, y III estarán a cargo del suscrito y del Asistente Interino de Química Cuántica Prof. Germán Krebs. El Cursillo IV estará a cargo del Asistente Interino de Espectroquímica Prof. Tomás Bense en colaboración con el Ayudante Honorario de esta Sección Bach. Oscar Giordano.

Sin otro particular saludo a Ud. muy atte,

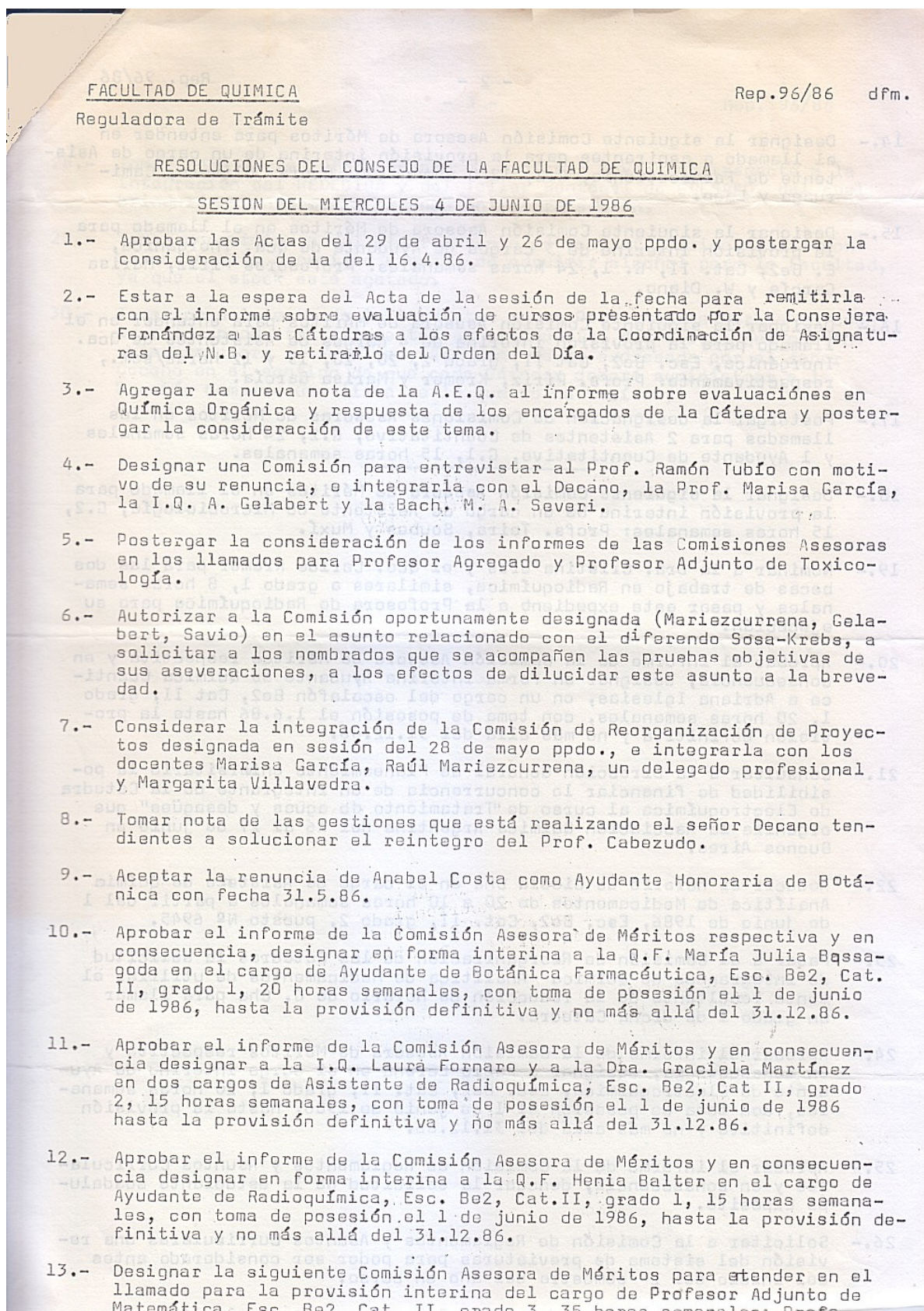
(fdo.) Prof. Ramón Sosa
Jefe de Sec. Quím. Cuántica y Espectroq.

Doc.8 Carta de la intervención denegándome una licencia sin goce de sueldo (Citado en Pág. 13)



(*) **Nota:** Se usarán corchetes [Ref.] para las referencias y llaves {Doc.} para los documentos del apéndice.

Doc.9 Resolución del Consejo mencionado una comisión para entender en el diferendo Sosa-Krebs (Citado en Pág. 13)



Doc.10 Carta del Decano Piriz ofreciéndome reintegrarme a mi cargo (citado en Pág. 14)