



## Profesor Dr. Rafael Almeida: un gran científico pero mejor amigo



**Dr. Rafael Almeida Mata**

Para este servidor es un gran honor poder hacer una semblanza del **Profesor Rafael Almeida** para la revista **Avances en Química** con motivo de haber obtenido el Premio “Lorenzo Mendoza Fleuri” que otorga la Fundación Empresas Polar en la edición del año 2017. Para empezar debo decir que este premio es más que merecido dado su dilatada trayectoria como investigador y lo único injusto es que no lo obtuviera antes, pero como dice el refrán, nunca es tarde cuando la dicha es buena.

Rafael nació en Caracas, año y medio antes del comienzo del periodo democrático en Venezuela. Sus primeros 22 años de vida los pasó en la capital, donde residía con sus padres y hermanos, en la popular parroquia Altagracia. A pesar de dejar la capital a finales de los años setenta para establecerse en las montañas andinas, Rafael lleva a Caracas en el corazón. Esto refuerza el dicho de uno es de donde crece, más allá de las vueltas que nos depara la vida. En el año 1973 ingresa a la Universidad Central de Venezuela a estudiar Química. Esos años en la UCV fueron cruciales en la formación de Rafael, no solo por la educación científica que recibió (una de las mejores de Latino-América para su tiempo), sino que le permitió desarrollar la otra faceta que siempre lo ha caracterizado: la dirigencia política.

En la UCV Rafael se destacó como dirigente político de izquierda (de la verdadera izquierda), incluso llegando a ser candidato para la presidencia de la FCU-UCV, elección que perdió (cosa que, en mi humilde opinión, significó una gran pérdida para la UCV). En los días de la UCV conoció a quien sería su compañera de toda la vida, la Prof. María González, con quien tendría 4 herederos. Curiosamente, sus primeros trabajos de investigación no fueron en el campo de la Fisicoquímica Teórica, fueron en Fisicoquímica Experimental, cosa que le permitió apreciar mucho mejor la interrelación que, en las ciencias existe entre el experimento y la teoría.

Quiso el destino que Rafael visitara Mérida poco después de su graduación de Licenciado en Química. En ese viaje entró en contacto con el recién formado grupo de Química Teórica de la ULA en la facultad de Ciencias; de esta visita terminó concursando y entrando en la ULA en septiembre de 1978 (este año se cumplen 40 años de este comienzo). Así, a la Mérida de finales de los años 70 llegaría casado y pronto allí tendría su primer heredero: Rafael Vladimir. Sus primeras investigaciones en la ULA se centrarían en la línea de investigación central, para ese momento, del grupo de química teórica: la descripción estadística de líquidos iónicos. En el año 1982 partiría con su esposa a realizar su doctorado en la Universidad de California, en el campus de Santa Bárbara. En California nacerían tres de sus hijos: Aimé, Agnes e Iván. En Santa Bárbara, además de tomar los cursos de Ph.D. en fisicoquímica, trabajaría tanto de “*teaching assistant*” así como de “*research assistant*”, esto último en el Instituto de Química Cuántica. Esa experiencia le permitió, entre otras cosas, superar los problemas de divisas causados por el viernes negro en 1983, que impidieron los desembolsos de su beca de doctorado. Rafael realizó su doctorado con el prestigioso fisicoquímico Horia Metiu. Su trabajo de investigación

se centró en las teorías para estimar la constante de velocidad en sistemas donde hay efectos cuánticos importantes, como por ejemplo la resonancia entre varios estados electrónicos. Este problema aun hoy en día se puede considerar abierto, ya que muchas de las aproximaciones usadas en la teoría del estado de transición fallan miserablemente. En 1987, una vez culminado su Ph.D., obtiene una beca para realizar un postdoctorado en el Instituto de Tecnología de California con Rudy Marcus (Premio Nobel de Química en 1992). En Pasadena colaboraría en un modelo teórico cuántico y semi-clásico para estudiar un conjunto de experimentos donde se envían pulsos ultra-cortos con un laser para promover la disociación de NaI y NaBr, y posteriormente se monitorea la evolución temporal usando la fluorescencia inducida en los átomos de Na con un segundo laser. Estos experimentos fueron realizados en el grupo de Ahmed Zewail (Premio Nobel de Química en 1999) quien es el padre de una disciplina denominada “*famto-química*”. El modelo publicado fue la primera descripción teórica exitosa de los experimentos de Zewail (quien es coautor del mencionado trabajo junto con Rafael y Marcus) y es una de las contribuciones científicas más importantes de Rafael<sup>1</sup>. Otra de sus contribuciones relevantes fue en el estudio teórico del mecanismo de transferencia electrónica en el régimen donde el aceptor de electrones está fuertemente acoplado al puente por donde deben pasar los electrones, y la transferencia de electrones se lleva a cabo en forma coherente en dos etapas sucesivas<sup>2</sup>. En Pasadena estaría hasta septiembre de 1989 cuando regresa a Mérida. En Mérida arranca sus investigaciones con problemas asociados a su trabajo en California, pero también llega a Venezuela a formar un grupo de trabajo. Sus primeros trabajos en Mérida versarían sobre los efectos cuánticos en la constante de velocidad. A mediados de los 90, Rafael incursionó en el campo de la óptica cuántica en un proyecto de colaboración con

## Semblanza

Pedro Colmenares, José Luis Paz y Emilio Squitieri. De esta colaboración se publicaron varios trabajos donde se introdujeron en forma estocástica el solvente en la solución de las ecuaciones de Bloch para un sistema de dos niveles<sup>3,4</sup>.

En este punto, debo decir que conocí a Rafael aproximadamente un año después de su regreso de los Estados Unidos en una reunión de ASOVAC en Cumana. Así mismo, admito mi ignorancia para ese momento en el tema del cálculo de la constante de velocidad, su especialidad. Dos años después, en 1992 volvimos a coincidir en el congreso de químicos teóricos de expresión latina que se llevó a cabo en la ciudad de Mérida, donde Rafael fue parte del comité organizador y contó con químicos teóricos de muy alto nivel. Posterior a este congreso, en el semestre septiembre 92-marzo 93, Rafael dictó un curso de Dinámica Molecular en la Universidad Central de Venezuela al cual asistimos varios estudiantes de los post-grados de física y química de la UCV, IVIC y la USB. De esa experiencia tengo un excelente recuerdo por el nivel académico y la importancia de los problemas estudiados. Un año y medio después, este servidor entraría como profesor en el grupo de química teórica de la ULA y empezáramos una colaboración que ya va para casi un cuarto de siglo y de la cual hemos publicado alrededor de unos 30 artículos. Esta dilatada colaboración se ha centrado en el uso de métodos de cálculo de estructura electrónica para estudiar algunas propiedades del enlace químico así como el estudio de sistemas enlazados por interacciones débiles; sin embargo, también hemos tocado tangencialmente muchos otros problemas. El primer artículo donde colaboré con Rafael fue galardonado en el año 1999 con el premio anual del antiguo CONICIT al mejor artículo en ciencias químicas. En este artículo se comparan dos teorías para caracterizar las propiedades de un enlace químico: la teoría de Enlace de Valencia y la teoría de "Átomos en Moléculas" de Richard Bader<sup>5</sup>. Este tema ha sido recurrentemente re-examinado de diferentes maneras a lo largo de estos últimos años.

Para el 2001, tuve la fortuna de colaborar con Rafael en un estudio sobre los efectos no-cooperativos en agregados de ácido fluorhídrico enlazados por puentes de hidrógeno. El que existan efectos no-cooperativos en agregados de puentes de hidrógeno suponen una desviación significativa del comportamiento clásico que se esperaría para estas interacciones si fueran puramente electrostáticas. Encontrar evidencias de este comportamiento no es nada fácil, ni experimental ni teóricamente. Los agregados de HF son particularmente útiles para este proceso ya que son relativamente fuertes y simétricos. El trabajo que se publicó en el 2001 ha sido uno que mejor acogida ha tenido en la comunidad científica, al menos en términos de número de citas<sup>6</sup>. Hoy en día está aceptado que los enlaces de hidrógeno no son perfectamente electrostáticos, pero para el momento de la publicación era controversial esa suposición. Caracterizar el enlace de hidrógeno es, todavía, un problema abierto y hay mucho camino por

recorrer. Esta línea de investigación la ha extendido Rafael gracias, por un lado, a la colaboración con el laboratorio de difracción de rayos X de la ULA y, por otro lado, a la aparición de nuevas técnicas teóricas para caracterizar los puentes de hidrógenos. Desde el año 1997, Rafael ha colaborado con el grupo del Prof. José Alvarellos Bermejo, de la Universidad de Educación a Distancia en Madrid. Como parte de esta colaboración fue invitado a realizar su año sabático en Madrid entre el 2004 y el 2005 donde extendió los trabajos sobre las propiedades del enlace químico.

Durante todos estos años en la ULA, su actividad política académica ha sido significativa y su preocupación por establecer estándares internacionales en investigación es inagotable. Desde su regreso de los Estados Unidos trabajo ha trabajado para establecer criterios de calidad y excelencia para el reconocimiento de la investigación y la actividad de postgrado que se realiza en la ULA, y en general en el país. Estos criterios eran prácticamente inexistentes en la ULA antes de 1990. Como uno puede entender, sin criterios bien definidos en cuanto a la calidad de investigación es difícil establecer una política de fomento a la investigación. En este sentido participé activamente en la creación de dos programas: el Programa de Estimulo a la Investigación y el programa de Apoyo a los Grupos de Investigación de la ULA. Estos dos programas supusieron unas reglas claras sobre cómo distribuir los escasos recursos destinados a la investigación que llegaban a la universidad, pero también supusieron ir en contra de prácticas nocivas, pero fuertemente arraigadas, basadas más en el clientelismo político que en la actividad científica. A partir de 1999, se presentó otro frente de batalla. La universidad, así como el resto del país, se ha visto, en cierta forma, políticamente divididos y la autonomía universitaria se ha visto fuertemente amenazada, tanto por factores internos a la universidad como por factores externos. Esto significó empezar una lucha por rescatar la verdadera excelencia académica, y no la universidad populista. Como parte de esta dinámica, formó parte durante un periodo completo del Consejo Universitario de la ULA, donde defendió siempre los valores académicos; posteriormente, en el año 2008 se postula como candidato para el decanato de la Facultad de Ciencias. Muchos profesores, entre los que me encuentro, apoyamos y defendimos esta candidatura. Desafortunadamente perdió, un tanto injustamente. Esto terminó sirviendo de lección para el futuro, pero de ninguna manera disminuyó el trabajo por hacer una universidad mejor.

Para los que lo conocemos, sabemos que discutir con Rafael no es fácil, ni cuando se discute de ciencia, ni de política, ni de nada. Hay que ir preparado por que si algo sabe es defender sus puntos de vista con argumentos sólidos y no darse por vencido fácilmente. Sin embargo no es absolutamente dogmático, al final del día, tiene la gallardía de reconocer cuando sus puntos de vista no son los más correctos. De esa experiencia uno aprende mucho y, por eso, ha podido crear un

## Semblanza

grupo, ya bastante reconocido tanto a nivel nacional como internacional.

No se si estas breves líneas le hacen realmente justicia a su trayectoria como universitario integral y como investigador. Sospecho que no, pero quiero aportar mi pequeño grano de arena por el merecido reconocimiento que hiciera la Fundación Empresas Polar a mi amigo Rafael Almeida, con quien espero seguir colaborando por muchísimos años más.

**Referencias**

1. V Engels, H Metiu, R Almeida, RA Marcus, A Zewail. Molecular state evolution after excitation with an ultra-short laser pulse: A quantum analysis of NaI and NaBr dissociation. **Chem. Phys. Lett.**, **152**, 1-4 (1988)
2. RA Marcus, R Almeida. Dynamics of electron transfer for a nonsuperexchange coherent mechanism. 1. **J. Phys. Chem.** **94(7)**, 2973-2977 (1990)
3. PJ Colmenares, JL Paz, R Almeida. On the optical stochastic Bloch equations. **Phys. Lett.**, **A199**, 163-168 (1995)
4. PJ Colmenares, R Almeida, JL Paz. Stochastic effects of the solvent on the absorptive and dispersive processes in a two-level system up to first order in the external field. **J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**, **28(19)**, 4377 (1995)
5. L Rincón, R Almeida. On the topology of the electron charge density at the bond critical point of the electron-pair bond. **J. Phys. Chem.**, **102(46)**, 9244-9254 (1998)
6. L Rincón, R Almeida, D García-Aldea, H Diez y Riega. Hydrogen bond cooperativity and electron delocalization in hydrogen fluoride clusters. **J. Chem. Phys.**, **114(13)**, 5552-5561 (2001)

**Luís Rincón Hernández**

Departamento de Ingeniería Química

Universidad San Francisco de Quito

[lrincon@usfq.edu.ec](mailto:lrincon@usfq.edu.ec)