

## 15.1 Laboratorio de Química Teórica

El Laboratorio de Química Teórica es un espacio Académico del Doctorado en Ciencias en Química dedicado al desarrollo del software de estructura electrónica que tiene su mayor aplicación en las áreas de la química, biología molecular y nano-ciencias. En particular el trabajo se centra en un par de paquetes de software. El primero de ellos es llamado deMon2k, el cual se desarrolla por diferentes grupos de Química Teórica de diferentes instituciones del mundo: Cinvestav (México), Universidad de Calgary (Canadá), Universidad de París del sur (Francia) y, por supuesto, la Universidad de Guadalajara, entre otras. El paquete deMon2k está basado en la Teoría de los Funcionales de la Densidad Auxiliar (ADFT, por sus siglas en inglés), cuya implementación es tan eficiente que lo hace uno de los paquetes con mejor eficiencia computacional disponibles hasta ahora. Ello se logra mediante la inclusión de novedosos métodos numéricos para efectuar las computacionalmente costosas operaciones de álgebra lineal que implica las ecuaciones de la ADFT así como máxima optimización del código. El otro código, el GREEN, es un paquete desarrollado únicamente en nuestro grupo y está enfocado en métodos post-Hartree-Fock. Este laboratorio está atendido por tres profesores investigadores adscritos al Departamento de Química del Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías: Dr. Roberto Flores Moreno, Dr. Mario Ulises Delgado Jaime y Dr. Bernardo Antonio Zúñiga Gutiérrez. Además se cuenta con el apoyo de los Doctores: Dr. Victor Manuel Medel Juárez y el Dr. Juan Crisóstomo Pacheco Kato quienes realizan una estancia posdoctorales en el mencionado laboratorio.

El laboratorio cuenta con 10 espacios con escritorios y sillas. 8 de esos espacios cuentan con computadoras de escritorio que tiene procesadores Core-i7 y varios gigas de memoria RAM. Además también se cuenta con un par de servidores con 28 procesadores Intel-Xeon cada una, estos procesadores están especializados para cómputo de matemáticas. Se tiene un acervo de más de cincuenta libros especializados en el área de la química teórica y computacional.

Se presenta evidencia fotográfica de este laboratorio.





