

## Robert G. Parr

El pasado lunes 27 de marzo, a los 95 años, nos ha dejado Robert G. Parr, uno de los artífices del pasmoso desarrollo experimentado por la Química Teórica y Computacional, en la segunda mitad del siglo xx y primeros años del XXI.

Robert Parr fue, sin ningún género de dudas, una de las mentes privilegiadas, que junto con otros gigantes de la ciencia del siglo xx, como John A. Pople, contribuyeron a convertir la Química Cuántica en una herramienta imprescindible para entender y racionalizar las propiedades de nuestro universo a nivel molecular. De hecho, una de las más tempranas y señeras contribuciones a este desarrollo, el método semiempírico Pariser-Parr-Pople, generalmente conocido como método PPP, lleva el nombre de estas dos grandes figuras junto con el de Rudolph Pariser, químico de la Dupont Co., que colaboraría con Robert Parr en su desarrollo, ya que curiosamente el método fue desarrollado independientemente por ellos dos y por John Pople.

Robert Parr está también detrás de muchos conceptos habitualmente usados por todos los químicos que, como la igualación de electronegatividades o de la dureza, no sólo han contribuido a entender mejor la fuerzas que rigen las reacciones químicas, sino que han permitido el desarrollo de nuevas metodologías usando nuevos principios de igualación de estas magnitudes.

El nombre de Parr está también detrás de la aplicabilidad y versatilidad de la Teoría del Funcional de la Densidad, más conocida a través de las siglas inglesas de "DFT", para el tratamiento de sistemas más y más complejos, más y más grandes con una precisión simplemente inimaginable hace dos décadas. De hecho el funcional más usado en el mundo se conoce con las siglas "B3LYP", cuyas tres últimas letras se refieren a los que desarrollaron la parte del funcional que trata la correlación. Han adivinado bien, la "P" de "LYP" corresponde a Parr. Tiene pues Robert Parr el reconocimiento implícito de miles y miles de investigadores de todo el mundo por



El profesor Robert G. Parr

haberles dotado de una herramienta de extraordinaria versatilidad y aplicabilidad.

La comunidad científica ha reconocido su valía y sus contribuciones en diversas ocasiones, habiendo recibido, entre otras distinciones, el Irving Langmuir Award en Química Física, o el Premio en Química de la United States National Academy of Sciences y tan solo ocho años anteriormente el Award en Química Teórica de la American Chemical Society.

Nacido en 1921 en Chicago, Robert Parr se graduó en la Brown University en 1942 y se doctoró en la Universidad de Minnesota en 1947. Desde 1974 era Full Professor en la Universidad de North Carolina at Chapel Hill.

Llegado a este punto sólo me resta añadir: ¡Gracias Robert, por tu magnífico legado!

MANUEL YAÑEZ  
Departamento de Química  
Universidad Autónoma de Madrid