

Ezequiel Leiva: su legado para las nuevas generaciones

Autor: ZOLOFF MICHOFF, Martín E; LUQUE, Guillermina L; OVIEDO, Oscar A.

Filiación Institucional: Universidad Nacional de Córdoba. Facultad de Ciencias Químicas
Departamento de Química Teórica y Computacional. INFIQC-CONICET. Córdoba, Argentina.

Contacto: martin.zoloff@unc.edu.ar



FIGURA 1. Ezequiel Leiva y Wolfgang Schmickler (2013).

● Los inicios

El Dr. Ezequiel Pedro Marcos Leiva es nativo de la ciudad de San Francisco, Córdoba; como hijo de un empleado bancario pasó su infancia por varias ciudades del interior cordobés. Entre Morteros, La Para, Las Varillas y Saturnino María Laspiur completó su educación primaria y secundaria, aprendiendo a adaptarse sobre la marcha a muy diferentes entornos sociales, lo que le fomentaría, a posteriori, su característica flexibilidad y el poder de adaptación que mostraría a lo largo de su carrera académica. De niño estaba fascinado por las estrellas y soñaba con ser astrónomo, pero una visita al Observatorio de Córdoba lo desanimó cuando el astrónomo que hacía las veces de guía le dijo que no era una carrera para cualquiera porque las matemáticas eran muy difíciles. Las vueltas del destino quisieron que en su extensa carrera de más de 4 décadas como docente universitario dedicara una buena parte a la enseñanza a la

Matemática y la Física, y fuera el motor que impulsó la creación del Departamento de Matemática y Física, hoy denominado Departamento de Química Teórica y Computacional, de la Facultad de Ciencias Químicas en la Universidad Nacional de Córdoba.

En 1975 Ezequiel “desembarcó” en una convulsa ciudad de Córdoba para estudiar Licenciatura en Físico Química, en la entonces joven Facultad de Ciencias Químicas.

Se recibió en 1979, y debido a un cambio en el plan de estudio, se vio “obligado” a completar su doctorado en 3 años. Así pues, en septiembre de 1982 recibió el título de Doctor en Físico Química. Su tesis doctoral, titulada “*Electro-oxidación de metanol con participación de superficies electrocatalíticas de naturaleza múltiple*” fue dirigida por la Dra. María Cristina Giordano, una científica pionera en la investigación en fisicoquímica en Argentina.

Es destacable que desde sus inicios Ezequiel siempre realizó trabajos que resultaron ser pioneros en su área (y al mismo tiempo desafiantes), aunque en algunos casos no fueron reconocidos en su debido tiempo. Por ejemplo, dos de sus primeros trabajos científicos publicados, uno en la prestigiosa revista *“Journal of the Electrochemical Society”* y otro en

“Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry” en el año 1983, siguen teniendo vigencia y son citados aún en la actualidad, lo que subraya su relevancia y el impacto de sus investigaciones en el desarrollo de la electroquímica.

● Desde la electroquímica experimental a la electroquímica teórica

En sus inicios en la carrera científica, Ezequiel estudió los procesos electroquímicos de oxidación de metanol y la deposición de metales, siempre de manera experimental, pero ya dando indicios de su naturaleza inquieta por aprender y/o emprender cosas nuevas, entre 1984 y 1986 realizó una primera estancia posdoctoral con el Prof. Wolfgang Schmickler en Bonn, por entonces la capital de la República Federal de Alemania. Allí comenzó a desarrollar programas basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (más conocido como DFT, por sus siglas en inglés), para realizar cálculos teóricos sobre aspectos fundamentales en la electroquímica, realizando aportes significativos a, por ejemplo, el modelo de la doble capa electroquímica. Eran los albores de la electroquímica teórica y del cómputo científico en general y la mayor parte del trabajo de cómputo en esa época era realizado en grandes máquinas que ocupaban una habitación entera a la cual se accedía desde terminales de uso compartido. Gracias al estipendio recibido por la beca que le fuera otorgada por el Servicio Alemán de Intercambio Académico (DAAD), Ezequiel fue capaz de comprarse una PC de 128 kB de memoria RAM y sin disco rígido. Para poder trabajar, la PC contaba con dos disqueteras de 5¼ en la cual se debían introducir un disco con el compilador en una, y en la otra otro disco en donde se escribía el programa.

Este giro hacia la electroquímica teórica marcó uno de los hitos más importantes en su carrera. En 1986 vuelve a Córdoba para seguir desarrollando su trabajo en el Departamento de Físicoquímica de la FCQ y en 1990 se integra a lo que en su momento se denominaba la Unidad de Matemática y Física,

unidad docente de la FCQ que había sido creada en 1983 para la enseñanza de estas asignaturas para las carreras de ciencias químicas. Ezequiel acepta el desafío de transformarla en una unidad académica dedicada no solo a la docencia, sino también a la investigación en temáticas, en principio, relacionadas a la electroquímica teórica. El grupo de investigación iniciado por Ezequiel fue creciendo y los temas de investigación se fueron diversificando. Al tiempo, sus discípulos y él mismo fueron generando nuevas líneas de investigación a las cuales se fueron incorporando nuevos estudiantes. En 2008 se creó el Departamento de Matemática y Física (DMF) dando así fruto al anhelo original de gestar un departamento de la FCQ en donde se desarrolle de manera conjunta docencia e investigación. Posteriormente, en 2016 el DMF es renombrado como Departamento de Química Teórica y Computacional (DQTC), reflejando de esta manera las líneas de investigación del grupo completo de trabajo. El DQTC fue consolidándose paulatinamente como un lugar de trabajo no sólo para los discípulos de Ezequiel, sino también para un gran número de investigadores, quienes comenzaron a desarrollar, a su vez, sus propias carreras científicas. En esos tiempos, la labor de Ezequiel no solo era académica, sino también la de un guía comprometido, brindando su apoyo incondicional y fomentando un ambiente de crecimiento y colaboración. Su liderazgo no se limitaba a la transmisión de conocimientos, sino que a la vez inspiraba a cada uno a alcanzar su máximo potencial, tanto en lo profesional como en lo humano.

● Desde la electroquímica teórica a la simulación a gran escala

A principios de la década del '90 Ezequiel regresa a Alemania para una segunda estadía postdoctoral nuevamente en colaboración con el Prof. Schmickler, quien ya en esa época se había establecido en la Universidad de Ulm. Esta vez la estadía fue financiada por la Fundación Alexander von Humboldt. A su regreso al país, Ezequiel recibe como donación de la Fundación Alexander von Humboldt una AlphaStation, una workstation avanzada para la época, que sirvió como semilla para las primeras tesis de doctorado en la Unidad de Matemática y Física, permitiendo correr programas basados en DFT avanzados para la época. El intenso trabajo de Ezequiel redundó en la consolidación de un grupo dedicado a estudios teóricos y computacionales en el ámbito de la electroquímica y temas relacionados. Este grupo representa en la actualidad uno de los más numerosos y prolíficos a nivel internacional en la temática. Cabe destacar que Ezequiel es autor del primer libro dedicado a la temática de *"Underpotential Deposition"* (Underpotential deposition, From Fundamentals and Theory to Applications at the Nanoscale". O. A. Oviedo, L. Reinaudi, S. García y E. P. M. Leiva, de la serie "Monographs in Electrochemistry". 2016 de la editorial Springer. ISBN: 978-3319243924), el cual registra a la fecha más de 9.000 descargas de su versión electrónica Su rol como promotor de la química teórica, lo llevó a encabezar la Red Argentina de Nanociencia

y Nanotecnología Molecular, Supramolecular e Interfase. En 2008 su compromiso y capacidad de gestión fueron claves para la adquisición, instalación y puesta en marcha de la supercomputadora "Cristina" (en honor a la Dra. María Cristina Giordano, una de las mentoras científicas de Ezequiel), la primera de alto rendimiento de la UNC y por mucho tiempo la más potente de Argentina. Bajo su dirección, más de 100 investigadores de todo el país encontraron en "Cristina" una herramienta esencial para sus investigaciones.

"Cristina", entró en servicio en marzo de 2010, fue adquirida con fondos aportados por la Agencia de Promoción Científica y Tecnológica a través de un Proyecto de Modernización de Equipamiento que fue otorgado a un consorcio formado por cuatro equipos de investigación, el dirigido por Ezequiel en Córdoba, y otros en La Plata, Buenos Aires y Bahía Blanca. Habiendo ya cumplido su ciclo de vida, "Cristina" salió de servicio a mediados de 2017, pero fue la semilla que dió lugar a la creación del Centro de Computación de Alto Desempeño (CCAD) de la UNC, el cual hoy en día aloja a los clusters de supercómputo "Serafín", el más poderoso de uso abierto para la comunidad científica en el país al momento de escribir este artículo.



FIGURA 2. Workstation AlphaStation



FIGURA 3. Supercomputadora "Cristina"

● Y de vuelta a la electroquímica experimental

Lo que distingue a Ezequiel, tanto a la persona como al científico, es su incomodidad para permanecer en su “zona de confort”. A diferencia de la rana en la fábula de la rana y la olla de agua hirviendo, Ezequiel siempre ha buscado nuevos desafíos, impulsado por su curiosidad y deseo constante de superarse.

En la década del 2010, contribuyó a la organización y firma de la carta intención con el objeto de dar lugar a la creación del “Centro de Energías Sustentables y Vectores Energéticos (CESVE)” y elegido luego Director por los representantes de las entidades conformantes: Universidad Nacional de Córdoba, a través de las Facultades de Matemática, Astronomía y Física, de Ciencias Químicas y de Cs. Exactas, Físicas y Naturales, el Instituto Universitario Aeronáutico, la Universidad Nacional de Catamarca, la Universidad Nacional de San Luis, el INIFTA, la CNEA, la CONAE, el Ministerio de Ciencia y Tecnología de la Provincia de Córdoba y la Empresa Generadora Córdoba S. A. Como eje temático de las reuniones del CESVE, se discutió el rol de la Universidad como una de las instituciones mejor preparadas para afrontar los retos de la sociedad actual y futura reconocida como un pilar fundamental del nuevo modelo productivo que “se articula en torno al conocimiento, la tecnología y la innovación”.

● Plantando las semillas

Como científico, el Dr. Leiva es un referente mundial en el área de electroquímica teórica desde hace más de dos décadas. Ha alcanzado los niveles de Investigador Superior en CONICET y de Profesor Titular Plenario de la Universidad Nacional de Córdoba.

Todas las facetas del Dr. Leiva son de destacar, desde su labor académica, su gran aporte científico, en gestión, y fundamentalmente su generosa personalidad, humildad y dedicación a todo lo que hace, siendo un gran ejemplo para seguir, como de hecho lo muestra su enorme demanda académica, tanto de nuevos investigadores como de aquellos formados. En la formación de recursos humanos, se puede

De estas discusiones, surgió la propuesta de disponer de un lugar para la creación de Parques Científicos que agrupan empresas innovadoras vinculadas a la Universidad, integrando en ellas a los investigadores como tecnólogos y sentando las bases para la creación de la actual Incubadora de Empresas de la UNC; siendo el Dr. Leiva un artífice fundamental en esta creación. Entre 2012-2014, Ezequiel creó, en colaboración con las Facultades de Ciencias Químicas; Matemática, Astronomía, Física y Computación, y la Facultad de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales de la UNC, el Laboratorio de Energías Sustentables “LaES”. En éste, se desarrollan estudios experimentales y teórico-computacionales de materiales para baterías de litio y otros sistemas de almacenamiento de energía. Estas actividades se desarrollan con un grupo que ha crecido de manera sostenida en el tiempo, desde su creación y contando con colaboraciones de investigadores de varias provincias de Argentina y del exterior. Tras una década de trayectoria, el LaES se ha consolidado como un referente en el campo.

Pioneros



señalar que ha dirigido 11 tesis doctorales exitosamente defendidas, ha sido director de 13 ingresos a la carrera de CONICET y director de numerosas tesinas de grado.



FIGURA 4. *Miembros de la entonces Unidad de Matemática y Física en 2006*

● Y recogiendo los frutos

Su creación científica es destacable, a la fecha de esta presentación: ha publicado 230 artículos originales en revistas internacionales de alto impacto, 19 capítulos y dos libros a pedido de la Editorial Springer, que registran a la fecha más de 33.000 descargas; además de dos patentes en el área de baterías de litio que ha sido registrada a nivel internacional. Asimismo, exhibe numerosas presentaciones en congresos nacionales e internacionales. El impacto sobresaliente se ve reflejado en su índice h de 31, contando con más 3.900 citas. Ha recibido numerosas e importantes distinciones, entre las que se destacan: premio a la excelencia académica en el año 1991, distinguido como uno de los Diez Jóvenes Sobresalientes del Año por la Bolsa de Comercio de Córdoba y la Fundación Banco de Boston en el año 1992, premio Rafael Labriola otorgado por la Asociación Química Argentina en el año 2001, nominado

como candidato para vicepresidente de la Internacional Society of Electrochemistry en 2011. Fue Consejero Académico Titular del Centro Latinoamericano de Formación Interdisciplinaria (CELFI), Sustentabilidad y Desarrollo designado por el Mincyt y editor del Journal of Solid State Electrochemistry. En 2023, Ezequiel recibió el premio KONEX en el área de la “Fisicoquímica y Química Inorgánica” y en 2024 el premio a la trayectoria “Agustín Arévalo” que otorga la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica (SIBAE). Asimismo, Ezequiel fue electo vicepresidente de la Sociedad Iberoamericana de Electroquímica para el período 2024 - 2026.

@Pioneros



FIGURA 5. Miembros Departamento de Química Teórica y Computacional en 2023

Para citación de este artículo: ZOLOFF MICHOFF, Martín E; LUQUE, Guillermina L; OVIEDO, Oscar A. (2024) “Ezequiel Leiva: su legado para las nuevas generaciones”, en Revista Bitácora Digital Volumen 11. N° 15. Pp. 112 - 116 (FCQ-UNC) Córdoba, Argentina.



Esta obra está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento- NoComercial - 4.0 Internacional.