

Semana de la Física 2004

18, 19 y 20 de mayo

El Departamento de Física Juan José Giambiagi organiza la Semana de la Física, con charlas, demostraciones y experimentos interactivos.

Charlas y demostraciones

9.30 a 10.00 hs.: Charlas:

- * «La física en (contra de) la ciencia ficción». A. Gangui
- * «Láseres: ¿qué tienen de especial?». M. Marconi
- * «El tiempo: ¿qué es o cómo se mide? Del reloj de sol al reloj atómico y más». O. Martínez

10.00 a 10.30 hs.: Demostraciones:

- * «Giróscopos y bicicletas». A. Fendrik y S. Ponce Dawson.
- * (A confirmar). O. Martínez y M. Marconi.
- * (A confirmar). O. Martínez y M. Marconi.

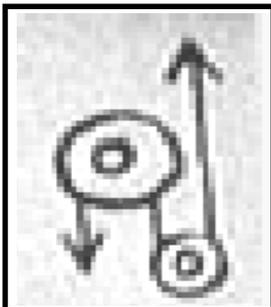
10.30 a 11.30 hs.: Intervalo

11.30 a 12.00 hs.: Charlas.

- * «Supermateriales: desde trenes levitados hasta encefalogramas». V. Bekeris.
- * «Agujeros negros: ¿qué son?, ¿dónde están?». D. Mazzitelli.
- * «Partículas elementales: ¿de qué estamos hechos?». D. de Florián.

12.00 a 12.30 hs.: Demostraciones.

- * «Experimentando con aire líquido». H. Ferrari.
- * «Giróscopos y bicicletas». A. Fendrik y S. Ponce Dawson.



* *Experimentando con aire líquido*. H. Ferrari.

14.00 a 14.30 hs.: Charlas.

* «Energía oscura: un misterio cosmológico». E. Calzetta.

* «Partículas elementales: ¿de qué estamos hechos?». D. de Florián.

14.30 a 15.00 hs.: Demostración
* (A confirmar). O. Martínez y M. Marconi.

* «Experimentando con aire líquido». H. Ferrari.

Aula Magna, 1er. piso, Pab. I.

Experimentos interactivos

9.30 a 15.00 hs.: «Muestra Permanente». Caída en el vacío, giróscopos, luz, color, visión, ondas, electricidad, magnetismo y más...

C. Iemmi, S. Ledesma, S. Goyanes, A. Márquez, D. Grondona, G. Pasquini, J. Mazzaferri, C. La Mela, G. Mattei, D. Arias Regalía, F. Vasta, M. Rodrigues, G. Romeo, G. Bengochea, M. Agüero, S. Azpiazu, C. Lopez, C. Cormick, M. Pirrera, D. Rodriguez, D. Goijman, M. Ruiz, M. Capoulat, M. Auliel, I. Sidelnik, M. Fleitas, F. Capalbo, P. Gimenez Molinelli, M. Laura González Silva, L. López Arrieta, M. Acuña, A. Yuhjtman, L. Amarilla, G. Garbarino, C. Chilliotte y G. Jorge.

En el Hall del Aula Magna y Laboratorio Básico de Enseñanza de Ondas y Termodinámica, 1er. piso, Pab. I.

Examen de salud obligatorio

El Consejo Superior de la UBA estableció las pautas a la que se ajustarán los alumnos de esta Universidad para la realización del examen de salud obligatorio que comenzará a implementarse a partir del mes de julio de 2004.

El examen se realizará en la Dirección de Salud y Asistencia Social a estudiantes con dos materias aprobadas como mínimo (segundo cuatrimestre del Ciclo Básico Común), y antes de la finalización del 2do. año de la Carrera respectiva.

Se citará a los alumnos para realizar el examen, siendo este mecanismo acordado con el CBC, Las Facultades y los Colegios, al fin de regular el flujo de concurrencia, considerando 300 exámenes diarios.

Se atenderá en la Dirección de Salud y Asistencia, de lunes a viernes, hasta las 19.00 hs.

El examen se completa en dos días, e incluye examen de laboratorio, odontológico, visual, presión arterial y entrevista psicológica.

Es condición obligatoria presentar planes de vacunación completos de hepatitis B y tétanos o constancia médica de contraindicación.

Una vez completado el examen, el médico entrega al alumno el certificado de cumplimiento de examen de salud remitiéndose en paralelo a la Unidad Académica respectiva.

En caso de detección de patología de riesgo para el alumno o para otros, tiene un plazo de seis meses para presentar certificados de estudios y tratamientos realizados.

La química computacional se ocupa de desarrollar métodos que permiten acelerar y simplificar los tiempos de investigación en áreas como el diseño de fármacos, la biotecnología y las ciencias de materiales. Esta novel disciplina, que hace uso intensivo de tecnologías informáticas, está modificando radicalmente la forma de hacer y entender la química.

Por Verónica Engler, Centro de Divulgación Científica, FCEyN

Si, como proponía Regis Debray (en *Vida y muerte de la imagen*), la historia del saber humano está dada por ecosistemas acordes con las técnicas de transmisión, determinados por los medios de comunicación disponibles, es indudable que el ambiente que habitamos ha cambiado rotundamente desde el advenimiento masivo de las computadoras a partir de la década del 80, cuando la tan mentada «revolución informática» comenzaba a estallar en todas direcciones.

Más allá de la posibilidad de transmitir información a velocidades increíbles hace tan sólo unas generaciones, lo que se modificó profundamente en los últimos años con el uso intensivo de las tecnologías informáticas es la manera de conocer en casi todas las áreas del saber. En ciencia, el adjetivo «computacional» ya se ha transformando en una especie de patronímico que, poco a poco, va dando cuenta del nuevo entorno en el que se conoce desde fines del siglo XX.

Un caso particular que se erige sobre esta gran patria digital es el de la química computacional, que se ocupa de la racionalización y predicción de propiedades de la materia mediante el empleo de técnicas computacionales, diseñadas para ofrecer soluciones en las áreas de desarrollo de fármacos, biotecnología y ciencias de materiales.

La química computacional se ocupa de modelar cuantitativamente fe-

Química de última generación

nómenos de interés químico usando tecnologías informáticas. Lo que hace es crear modelos numéricos capaces de reproducir de forma precisa la realidad que se quiere estudiar. Para esto se desarrollan algoritmos eficientes, se utilizan distintos paradigmas de computación y se diseñan técnicas de visualización y presentación de datos (como los típicos gráficos moleculares).

«Estos modelos (computacionales) también cambian la manera en que uno ve y enseña la química. La química que se enseñaba hace cincuenta años era distinta de la que enseñamos ahora. De hecho, un químico que va a salir egresado de esta Facultad, dentro de unos años, tiene que manejar estas herramientas informáticas», comenta Darío Estrin, profesor del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física de esta Facultad.

Estrin dirige el Grupo de Modelado Molecular (GMM) que tiene como objetivo fundamental aplicar modelos fisicoquímicos que, implementados en programas de computadoras, permiten hacer lo que se llama un «experimento de simulación» con el cual se puede obtener una predicción acerca de un sistema determinado, como por ejemplo, la interacción de dos proteínas dentro de una célula.

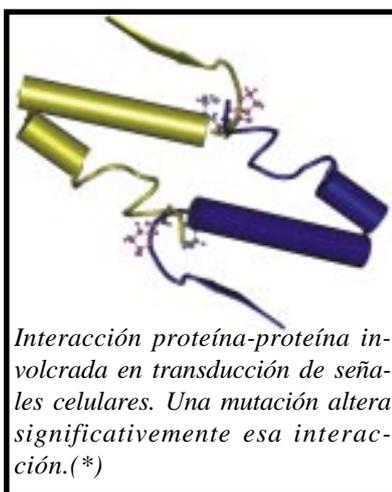
Básicamente, lo que hace este grupo es desarrollar métodos que permiten acelerar y simplificar los tiempos de investigación. Muchas veces este trabajo se orienta a resolver problemas concretos que plantean científicos de otros grupos. Por ejemplo,

un equipo de la FCEyN que está investigando sobre el Mal de Parkinson tenía ciertas dudas acerca de qué aminoácidos influyen en el desarrollo de esta enfermedad. «En una proteína, llamada DJ-1, el cambio de uno de sus ciento noventa aminoácidos, está asociado con la enfermedad. Entonces, como la proteína tiene una estructura compleja, lo que debemos averiguar es qué efectos produce sobre ella el hecho de cambiar un aminoácido específico -explica Adrián Turjanski, integrante del GMM-. A veces, con las técnicas experimentales que hay no se puede llegar a la respuesta, y sí se pueden obtener resultados con modelos computacionales».

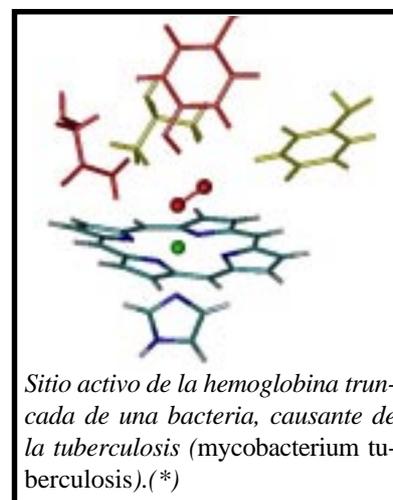
«Simulando el interior de la materia»

«Simulando el interior de la materia»

Para conocer en detalle el diminuto universo que hay en el interior de cada célula, en la actualidad las técnicas experimentales quedan rengas si care-



Interacción proteína-proteína involucrada en transducción de señales celulares. Una mutación altera significativamente esa interacción. ()*



Sitio activo de la hemoglobina truncada de una bacteria, causante de la tuberculosis (mycobacterium tuberculosis). ()*

cen de una apoyatura informática que les permita recrear aquello que se puede ver en un tubo de ensayo.

Observando el ajetreo permanente al que están sometidas la infinidad de moléculas que pululan dentro de la célula, se puede estudiar muchas de las interacciones en las que se ven involucradas estas diminutas partículas. Pero, lo que difícilmente pueda hacer quien observa es deducir de esos movimientos agitados la lógica que guía la dinámica de ese pequeño cosmos que es la célula. Para comprender en detalle qué sucede en cada región, es necesario poder realizar una especie de *zoom* que permita focalizar y analizar sin las limitaciones que impone la observación «en vivo y en directo» de las técnicas experimentales.

Producir una especie de realidad virtual en la que se proyecta aquello que sucede en un porción acotada de célula, hace posible recrear una y otra vez esa «escena» sin necesidad de insumir el tiempo y los recursos que requeriría repetir un experimento con el fin de asir, por ejemplo, los detalles necesarios para comprender una reacción química determinada.

Las técnicas de simulación -en las que se utilizan modelos tanto de la física clásica como de la cuántica- no eliminan la experimentación en el laboratorio, sino que sirven como una herramienta versátil para sonsacar nuevos datos del funcionamiento de la materia.

«Hay una primera aplicación que es previa al experimento, la simulación puede servir para guiarlo -describe Turjanski-. Con una simulación es posible predecir qué reacciones van a ocurrir. Entonces se puede ahorrar tiempo, porque ayuda a decidir qué experimentos conviene ha-

cer y cuáles no. Además, una vez que se tiene un resultado experimental, la simulación permite darle



una mirada microscópica que no es accesible experimentalmente». La simulación brinda la posibilidad de entender por qué y de qué manera ocurre un proceso determinado que desencadena los resultados que se pueden observar en el experimento.

Saberes digitales

La química computacional ha ido creciendo en los últimos años hasta convertirse en una sólida e importante disciplina de la química moderna, tanto desde el punto de vista industrial como académico. De hecho, la industria demanda cada vez más expertos en química computacional.

«En las páginas de Science en donde salen los avisos de trabajo, una proporción del diez o quince por ciento de las ofertas laborales dentro del área de la farmacéutica es para químicos computacionales», informa Estrin.

El cambio que se produjo en la industria y la consiguiente modificación en el perfil de los profesionales buscados se debe en buena medida a que los métodos computacionales se utilizan para resolver problemas químicos que serían intratables o muy complicados desde el punto de vista experimental. Además los «experimentos de simulación» son más baratos y controlables que los reales. Este tipo de tecnologías tiene claramente

interés para la industria ya que implica una disminución de costos.

«En la revista de química general más importante que hay, que es el Journal of the American Chemical Society, actualmente un veinticinco por ciento aproximadamente de los artículos tienen una parte importante de computación. No son necesariamente artículos sólo de simulación, en muchos casos son artículos que también incluyen experimentos», cuenta Estrin y agrega: **«Posiblemente dentro de unos años, si uno no tiene alguna confirmación con algún método computacional, le será difícil ubicar un resultado».**

Los programas de simulación que se utilizan en química se pueden comprar hechos o se pueden desarrollar. En el GMM, en general, optan por esta segunda alternativa, **«tratamos de desarrollar nuestros propios métodos, porque tener una mirada desde adentro nos permite entender las cosas más profundamente»**, reconoce el investigador.

(*) Imágenes obtenidas a partir de simulaciones.

Computadoras mancomunadas

En este momento, el Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física cuenta con un *cluster* (grupo) de veinticuatro procesadores -comprados con dinero proveniente del FOMEC y de otros subsidios-, administrado por el GMM, que se utiliza para docencia y para las simulaciones que necesiten hacer los grupos de investigación que integran el Departamento.

La idea es conseguir financiamiento suficiente para hacer crecer el *cluster* hasta, por los menos, doscientos procesadores.

Con esta capacidad instalada, se podrían desarrollar simulaciones que hacen uso de un gran poder de cómputo para resolver los cálculos implicados en los modelados.

En la Red

Sobre este tema se puede consultar los siguientes sitios:

<http://www.qi.fcen.uba.ar/personales/dario/>

<http://www.relaq.mx/RLQ/cuba/lqct.htm>

<http://www.ccc.uga.edu/>

<http://iqc.udg.es/>

Cursos de Extensión en Computación



El Departamento de Computación de la FCEyN anuncia los próximos cursos de extensión:

* **ASP.** Sábados, de 9.00 a 13.00 hs. Comienzo: 8 de mayo.

* **Programación con JAVA.** Sábados, de 13.00 a 17.00 hs. Comienzo: 8 de mayo.

* **Programación en C ++.** Sábados, de 14.00 a 17.00 hs. Comienzo: 8 de mayo.

* **Networking Technologies III.** (NET-TECH III Tercera Parte, Configuración Básica de *Routers*). Sábados, de 13.00 a 17.00 hs. Comienzo: 15 de mayo.

* **Introducción al análisis de tráfico de red.** Sábados, de 9.00 a 13.00 hs. Comienzo: 22 de mayo.

* **Linux II.** Sábados, 9.00 a 13.00 hs. Comienzo: 5 de junio.

Horario de Secretaría: lunes y jueves, de 17.00 a 20.00 hs.

Por contenidos, aranceles y otros cursos consultar en el website:

<http://www.dc.uba.ar/people/cursos/extension/homepage.html>

Descuento de un 20% para personal de la UBA y alumnos de universidades nacionales. El costo de los cursos incluye entrega de material de estudio. Una persona por máquina. Cupos limitados.

Inscripción e informes: Teléfono: 4576-3359.

E-mail: extension@dc.uba.ar

Becas de doctorado



La Agencia de Promoción Científica y Tecnológica busca licenciados en química, física y matemática para una beca de un año de duración, renovable hasta tres.

La beca se desarrollará en el Grupo de Sistemas Complejos del Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, en La Plata, Buenos Aires.

Temas de trabajo:

* Ruptura dieléctrica en materiales.

* Cálculos teóricos mecánico cuánticos aplicados a la química y la física.

* Formación de patrones espaciotemporales en reacciones químicas.

* Comportamiento Complejo de Sistemas Biológicos.

Todos los temas cuentan con vínculos de cooperación internacional y la posibilidad de realizar estancias cortas en el exterior (España, Inglaterra, Alemania)

Se requieren conocimientos básicos de programación (no excluyente).

Los interesados deberán enviar su cv a: eemola@inifta.unlp.edu.ar

GREMIALES

Paro de la AGD

El Secretario General de la AGD de Exactas, Rafael González, hizo circular un mail dirigido a los docentes en el que declara que «el Gobierno acaba de dar aumento a los estatales (que aunque no es lo que piden ni está generalizado, está ‘en camino de’), discriminando una vez más a los docentes y no docentes nacionales, entre ellos, a los universitarios.

»En nuestro caso, ni siquiera se hizo efectivo el aumento de entre 20 y \$30 para docentes simples, y el de \$50 para exclusiva, que derivaba del blanqueo de adicionales (...). Los es-

tatales consiguieron el aumento, porque, como viene validando la práctica, iniciaron un plan de lucha, cuya última expresión fue el paro del 29 de abril, al que también adhirió CONADUH. Pero esto no se manifestó con la misma fuerza en nuestro ámbito, aunque también tuvo su alcance (...)

»El Congreso de CONADUH, decidió parar el martes 11, y miércoles 12 de mayo a nivel nacional. (...) Por un aumento de emergencia de \$250 más un 40% aumento (aydte. de 1ra. semiexcl.) más nomenclador 87».

Por razones de organización, la Semana de la Biología 2004, programada para los días 8, 9 y 10 de junio de 2004, trasladó su fecha de realización para fines del mes de octubre de 2004.

Cable Semanal - Órgano de información comunitaria editado por la Oficina de Prensa de la FCEyN (SEGBE). Editor responsable: María Fernanda Giraud. Con la colaboración permanente del Centro de Divulgación Científica. Diseño: Mariela Rotman. Impresión: Daniela Coimbra. Circulación: Rodrigo D'Errico. Las notas firmadas son responsabilidad de sus autores.

Para comunicarse con la redacción dirigirse a la Oficina de Prensa, Planta Baja del Pabellón II (frente a EUDEBA), Cdad. Universitaria (1428), Buenos Aires. Teléfonos (directo) 4576-3337 o conmutador: 4576-3300, internos 371 y 464, FAX 4576-3351. E-mail: cable@de.fcen.uba.ar La colección completa de los Cables se puede consultar en: <http://www.fcen.uba.ar/prensa>.

Para recibir la **versión electrónica del Cable Semanal** enviar un mail a: ecable-owner@de.fcen.uba.ar solicitando la suscripción.

