

dentro de una actividad científica normal.

Hasta qué punto la influencia de la computación está impregnando la Química en todas sus vertientes puede deducirse de las iniciativas, patrocinadas tanto por organismos públicos como privados, sobre la investigación de las estructuras tridimensionales de las proteínas (CASP) y de las propiedades de fluidos de interés industrial.

EL PLEGADO DE PROTEÍNAS

CASP es una competición bianual en la que se propone la predicción de estructuras proteínicas ya conocidas, pero que se mantienen sin publicar. El objetivo es evaluar la potencia de los diferentes métodos de predicción que han ido desarrollándose, con vistas a aplicaciones futuras (CASP = *Critical assessment of techniques for protein structure prediction*), y la próxima edición CASP5 tendrá lugar en Asilomar (California) en diciembre de este año. Compaq y el Centro de Supercomputación de Pittsburgh son los patrocinadores.

PROPIEDADES DE FLUIDOS INDUSTRIALES

Por otra parte, las investigaciones sobre propiedades de diversos fluidos de interés industrial cubren

determinaciones de viscosidades, densidades y mapas de fases. Estos objetivos pueden abordarse con métodos de simulación molecular (Monte Carlo, Dinámica Molecular). Éste es un concurso anual organizado por el Instituto Americano de Ingenieros Químicos (AIChE), cuya presente edición se resolverá en noviembre en Indianápolis.

¿Cinco por tres...?

La complejidad de las dos tareas anteriores es muy alta y requiere el empleo de computadores con grandes prestaciones de velocidad y capacidad. Por ejemplo, en el análisis de proteínas mencionado se emplearán supercomputadores que comprenden 3000 procesadores y que operan en picos de velocidad de 6 "teraflops" (6 billones de operaciones por segundo). Esta maravilla está en Pittsburgh como resultado de la colaboración entre los patrocinadores de este concurso.

A pesar de estas fantásticas cifras no dejaría de ser interesante disponer de medios de cálculo aún más potentes, siempre quedan problemas más complejos por resolver. Tal vez una solución sea *la computación cuántica* pero, aunque nunca se sabe, este objetivo está lejos de ser inmediato. Recientemente, en el centro IBM de Almadén (USA) se ha llevado a cabo la más compleja operación de computación cuántica

hasta el momento: la descomposición en factores del número 15.

La base de esta computación está en disponer de un fantástico número de moléculas (del orden de 10^{18}) cuyos espines nucleares (qubits) interaccionen unos con otros, puedan ser programados con pulsos de radiofrecuencia, y puedan ser detectados utilizando instrumentos de RMN (Resonancia Magnética Nuclear). Para realizar la descomposición factorial anterior, químicos de IBM sintetizaron una nueva molécula con dos átomos de carbono y cinco de flúor, lo que parece estar en el límite experimental de la síntesis de moléculas con las características deseadas. En consecuencia, otras opciones se están barajando como, por ejemplo, espines electrónicos en nanoestructuras semiconductoras o flujos electrónicos a través de superconductores. Así, no sólo la computación forma ya parte de la Química, sino que la Química también puede ayudar a resolver problemas tanto de capacidad de cálculo como informáticos en general. Estas nuevas aplicaciones de nuestra disciplina contribuirán sin duda a revitalizarla y a hacerla más atractiva para las próximas generaciones de estudiantes.

Luis M. Sesé
Dpto. de Ciencias y Técnicas
Fisicoquímicas

SEMBLANZAS DE LOS PREMIOS NOBEL 2001

El Premio Abel de Matemáticas

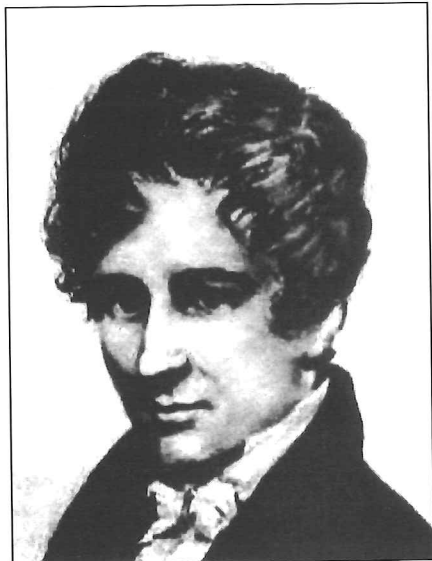
En agosto del 2001, el primer ministro de Noruega anunciaba la creación del Premio Abel, un nuevo premio internacional de matemáticas, en honor de Niels Henrik Abel (ver nota en pie de foto). El premio se otorgará por primera vez en el 2003 y será anual. La cantidad con

que está dotado el premio es parecida al de los Premios Nobel, alrededor de 600.000 US\$.

La idea del premio Abel, propuesto por el conocido matemático noruego Sophus Lie, se remonta a finales del siglo XIX, pero es el departamento de matemáticas de la

Universidad de Oslo, con motivo del bicentenario del nacimiento de Abel, quien ha hecho posible la creación de dicho premio.

El premio Abel será administrado por la Academia Noruega de Ciencias y Letras. Para la planificación del premio ha contado con la ayuda de la Academia Sueca (que administra los premios Nobel) y con la International Mathematical Union.



Niels Henrik Abel nació el 5 de agosto de 1802 en Fridoe (Noruega) y murió en Froland (Noruega) el 6 de abril de 1829. Estudió en la universidad de Oslo y ya desde muy joven destacó en los estudios de matemáticas, obteniendo en los pocos años que vivió resultados importantes en diversos campos. Demostró la imposibilidad de resolver las ecuaciones de quinto orden por radicales, obtuvo importantes resultados sobre las integrales elípticas, funciones elípticas, así como sobre la no-resolución de ecuaciones de orden mayor que cuatro mediante radicales, adelantándose así a los trabajos de Galois.

La Academia Noruega estará apoyada por un comité formado por cinco miembros y un grupo de asesores científicos compuesto por 20 ó 30 miembros, a su vez constituido por un importante número de matemáticos de fuera de Noruega.

Los fines primarios que tiene en mente el comité es la calidad, así como conseguir que el premio alcance un gran aceptación por parte de la comunidad internacional de matemáticos.

José Antonio Bujalance García
Dpto. de Matemáticas Fundamentales

El Premio Nobel de Física 2001

El día 10 de octubre del año 2001 se entregó el Premio Nobel de Física a Eric A. Cornell y Carl E.

Wieman, norteamericanos, que lo compartieron con el alemán Wolfgang Ketterle. El premio les fue concedido por la realización de la condensación Bose-Einstein en nubes gaseosas de átomos alcalinos, así como por sus estudios pioneros fundamentales sobre las propiedades del condensado.

En el número 3 de esta revista, el Profesor Javier García Sanz da cuenta de estos trabajos entre las novedades científicas (100cias@uned, n.º 3, pág. 70) y describe lo que es un condensado de Bose-Einstein.

Por regla general, en un gas los átomos se mueven caóticamente ejecutando una danza frenética. Este movimiento caótico de los átomos está asociado al concepto de temperatura. Cuanto más caliente está un gas, mayor es la velocidad promedio de los átomos (es decir, la energía cinética media del conjunto) y mayor es el número de choques entre ellos. En cada instante, la temperatura es proporcional a la energía cinética media, y caracteriza el conjunto. No obstante, a cada temperatura pueden encontrarse átomos moviéndose en cualquier dirección y a cualquier velocidad, pero el número de ellos que tienen una determinada velocidad cambia al cambiar la temperatura. Pero si se enfría el gas fuertemente, la velocidad promedio de los átomos disminuye, sus movimientos se calman y algunos de ellos llegan a coordinarse entre sí, imitándose unos a otros, ocupando el mismo estado cuántico (la misma energía, el mismo espín, etc.), constituyendo así un nuevo estado de la materia que se denomina el condensado de Bose-Einstein, que éste último predijo en 1925 basándose en los estudios del primero. De esta manera un grupo de átomos puede llegar a constituir una especie de átomo gigante si la temperatura es suficientemente baja.

El modelo de Einstein supone que las interacciones electromagnéticas entre las partículas son despreciables, pero conseguir este estado con un gas es muy difícil. Por esta razón ha sido necesario esperar setenta años, hasta 1995, para poder

fotografiar un condensado. Los primeros que lo hicieron fueron Cornell y Wieman en la Universidad de Colorado. Lo consiguieron enfriando átomos de rubidio hasta alcanzar una temperatura de veinte mil millonésimas de grado Kelvin. Es decir, prácticamente en el cero absoluto de temperaturas¹.

La manera de enfriar los átomos de rubidio a esta temperatura se logra mediante dos procesos: el enfriamiento por láser y el almacenamiento en una trampa magnética. El láser, haciendo que los átomos choquen con los fotones que envía, logra frenarlos por absorción. Con un campo magnético se capturan los átomos así frenados, expulsando del conjunto poco a poco los más rápidos de ellos. De esta manera su agitación (es decir, la temperatura) disminuye gradualmente, consiguiendo que sus estados cuánticos sean idénticos creando así el primer condensado que constaba de unos 2.000 átomos de rubidio.

En 1997, Ketterle, en Alemania, repitió el experimento con átomos de sodio. Consiguió aglutinar a un mayor número de átomos, y pudo observar efectos interferenciales entre dos condensados de átomos de sodio separados durante la expansión posterior. Esta experiencia demostraba que los átomos actuaban colectivamente en un fenómeno cooperativo. En la actualidad, estos trabajos solamente han conseguido crear estas condiciones sólo de manera pulsante. Es decir, en cortos intervalos de tiempo. El objetivo actual es el conseguir el condensado de manera permanente para obtener una fuente coherente continua, un láser de partículas, con las magníficas propiedades de los láseres de fotones. Es una manifestación más del hecho cuántico de la dualidad onda-cóspusculo.

Eric A. Cornell nació en Palo Alto (California) en 1961. Recibió el Premio Nobel, por lo tanto, a sus 40

¹ Recuérdese que, según el Tercer Principio de Termodinámica, es imposible alcanzar el cero de la temperatura absoluta mediante un número finito de ciclos de enfriamiento.