

El *proxy* millora la qualitat de servei a Internet

pare s

REDIRIS

NLANR

germans

CESGA

GICA

EHU

Rcanaria

UCLM

UJI

Uniovi

UPV

UV

fills

ECM

UAB

UPC

URL

XTEC

HGV

ICM

JMS

SCS

■ Entrevista amb
F. Xavier Avilés,
premi Ciutat de Barcelona
d'Investigació Científica

■ Centre de Ciències
de Benasc

LES PETICIONS DURANT EL MES D'ABRIL VAN SUPERAR ELS 16 MILIONS

El *proxy-cache*, un servei en alça que millora la qualitat de servei a Internet

Des que el passat mes de setembre es va posar en marxa el servidor de *proxy-cache*, el servei ha estat cada cop més utilitzat pels usuaris. El mes d'abril d'enguany, per exemple, s'ha arribat a la xifra rècord de 16 milions de peticions i s'espera

que aquesta xifra continui creixent. Però a més d'aquesta dada quantitativa, també cal destacar-ne una de qualitativa: el servei de *proxy-cache* millora la qualitat de servei a Internet ja que permet que els accessos a les planes siguin més ràpids.

L'acceptació del *proxy-cache* que ofereix el CESCA des del passat mes de setembre (vegeu TERAFLUP 35) ha crescut paral·lelament al perfeccionament del servei. L'agermanament progressiu amb diversos *proxy* d'altres comunitats autònomes i les millores en la línia internacional, així com una abundant difusió del seu ús i els seus avantatges, han estat decisius en l'èxit.

Cada cop més germans

Com ja s'havia explicat al TERAFLUP, els servidors de *proxy-cache* estan relacionats entre ells com si fossin una família i és per això que les relacions entre servidors es descriuen usant termes com germans i pare. Dos *caches* germanes —quan una demana informació a l'altra li torna el document només en cas que ja el tingui emmagatzemat, però no li va a buscar a la xarxa si no el té— del mateix nivell per passar-se informació es pregunten contínuament si en tenen.

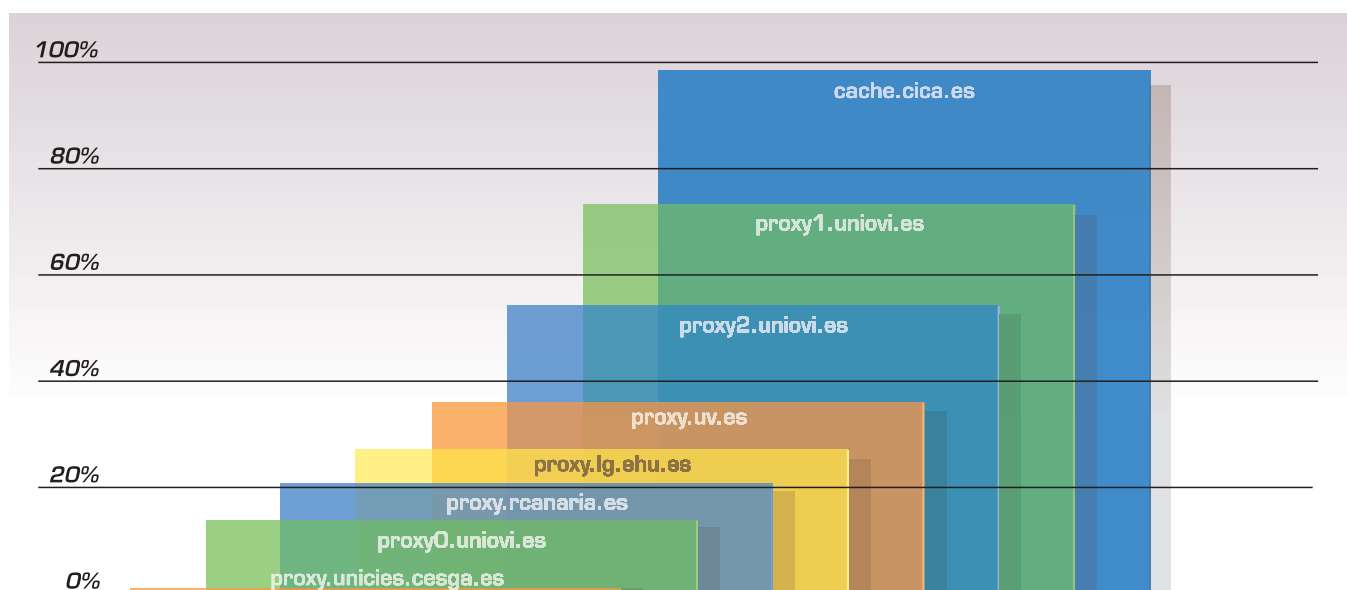
La Universidad de Castilla-La Mancha és germana del *proxy* del CESCA des de la primera setmana de maig

Aquest constant intercanvi de preguntes provoca de vegades un tràfic innecessari en la xarxa que fa que aquesta es carregui. Per evitar-ho, s'usen els *cache-digests*. Aquest mètode consisteix en l'enviament periòdic de missatges molt encriptats i resumits amb els quals una *cache* informa la seva germana sobre el contingut que té. Això evita que s'hagin d'anar a preguntar cada cop que una germana vol informació de l'altra. El *cache-digest* és un resum del contingut d'un servidor *proxy-cache* que permet, d'una banda, un accés més ràpid a la documentació continguda al servidor i, de l'altra, que cada servidor pugui veure d'una ullada què contenen els altres.

Les primeres *caches* en agermanar-se van ser el CICA, el Centro de Comunicaciones CSIC/RedIRIS, CESCA, Complejo Hospitalario Xeral-Cies de Vigo (CESGA), Red Canaria, Euskal Heriko Unibertsitatea, Universidad de Oviedo, Universitat de València i Universitat Politècnica de València. Des de la primera setmana de maig hi ha un nou germà que és la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM).



Informació servida als germans del CESCO (Requests: març 1999)



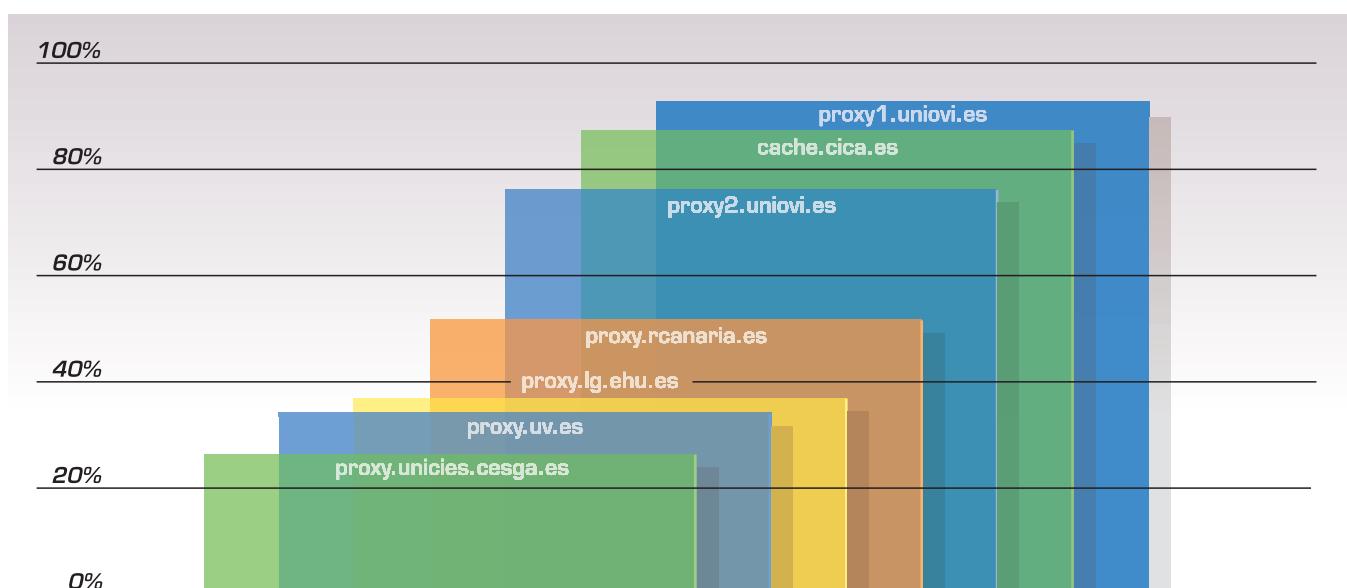
La idea de l'agermanament va ser exposada per primer cop per un membre del CICA a les Jornades Tècniques de RedIRIS 1998 celebrades a Barcelona al mes de novembre de l'any passat. L'experiència de l'agermanament, pensada de moment per a nivells regionals, és experimental però està donant molt bon resultat.

Augment espectacular

L'èxit del servei de *proxy-cache* ha quedat de manifest set mesos després que es posés en funcionament. Si es fa una ullada a les dades del nombre de peticions dels darrers mesos (vegeu gràfica) s'observa que al gener hi va haver 5.471.452 peticions. Al febrer,

aquesta xifra va doblar-se fins arribar als 10.573.818 de peticions. Aquest nombre, que suposava un augment espectacular, no va ser un pic aïllat i, tal com s'esperava, va continuar creixent i s'ha convertit en una tendència. Al març, el nombre de peticions al *proxy* va ser de 14.784.156 i a l'abril s'ha arribat a la xifra de 16.185.589.

Informació rebuda dels germans del CESCO (Requests: març 1999)



S'espera que les xifres, tot i així, continuïn en augment.

Si es fa un estudi una mica més detallat i a tall d'exemple, entre el 27 d'abril i el 6 de maig hi ha hagut 1.373 màquines que s'han connectat al proxy, entre usuaris finals, germans i fills. Segons les mitjanes del mes d'abril i considerant que era un mes on hi havia molts dies festius, es pot afirmar que hi havia unes 574 connexions de mitjana al dia, tenint en compte dies laborables i festius. Prenent com a referència només els dies laborables hi havia unes 800 connexions aproximadament, i unes 170 els festius.

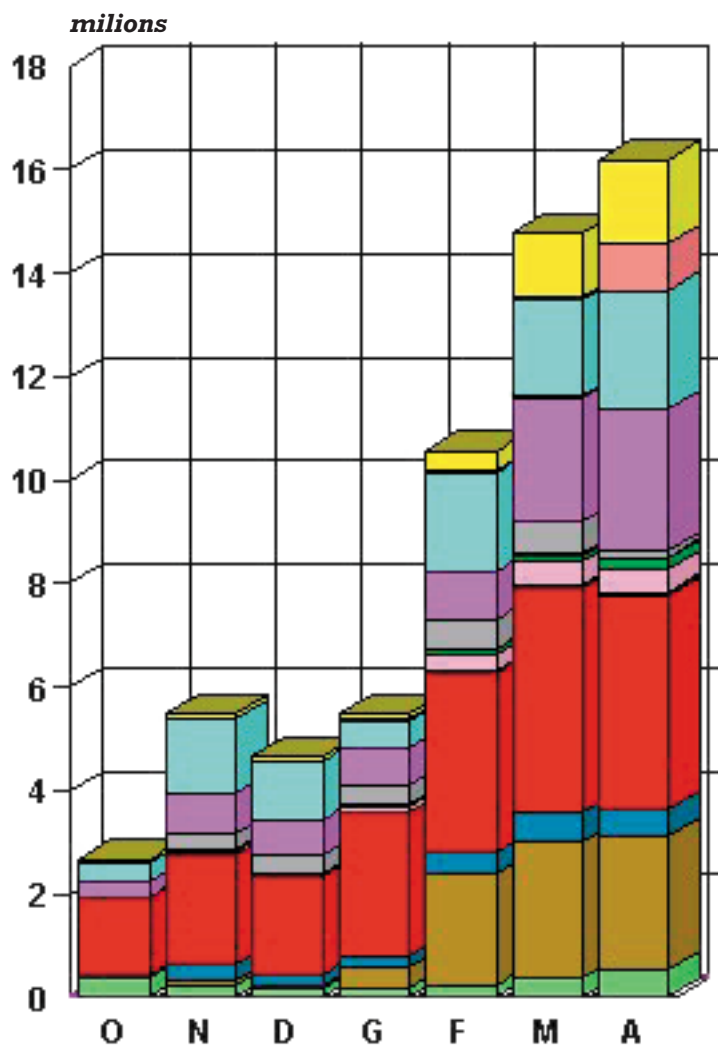
Si tenim en compte les peticions que el CESCA serveix a d'altres institucions, es pot dir que la UPF és qui fa més peticions, seguida de la UAB, la Universitat de Vic i la XTEC. Pel que fa al nombre de bytes servits, en canvi, la majoria han anat a parar a la UAB i, després, a la UPF. Aquest fet demostra que no sempre la institució a qui es serveixen més peticions és a la qual s'envia més tràfic. Això es pot observar també a les dues gràfiques de la pàgina anterior.

L'augment espectacular de les peticions del proxy es deuen a diversos motius. D'una banda, cada cop hi

ha més usuaris que el coneixen, cosa que fa el servei més eficient. De l'altra, també es van afegint fills a la família del proxy, que es va fent més gran. A mitjans de maig, per exemple, el CESCA va adoptar un nou fill, la UPC. Finalment, també pot influir en aquest augment el fet que els germans també fan peticions i demanen informació i això queda comptabilitzat.

Ara per ara, els fills del proxy del CESCA són: UAB, XTEC, el Servei Català de la Salut (SCS), l'Hospital General de Vic, ICM-CSIC, Estructura i constituents de la matèria (ECM) de la UB.

Augment de peticions al proxy (octubre de 1998 - abril de 1999)

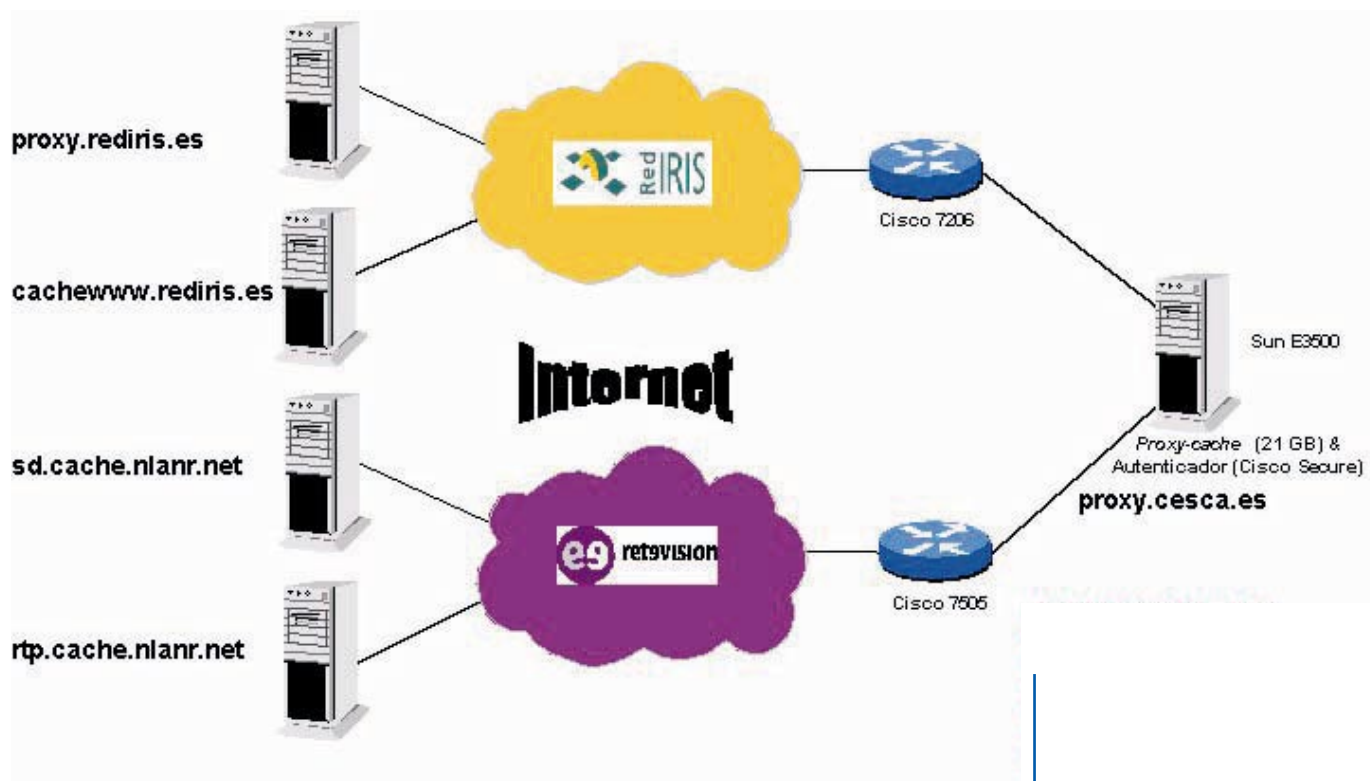


	1998	1999
Peticions	12.841.202	47.015.015
MB	73.735	350.207

*servidor propi

UB*	2,9%	2,6%
UAB*	16,6%	22,4%
UPC*	3,6%	4,4%
UPF	31,3%	22,0%
UdG	0,1%	0,1%
URV	0,2%	0,2%
UdL*	2,8%	2,1%
UOC	0,9%	2,1%
CSIC	0,2%	0,2%
URL*	3,6%	2,9%
UVic	14,4%	11,9%
CSPT	0,1%	1,6%
XTEC*	14,0%	12,9%
SCS*	2,0%	2,0%
Altres*	7,2%	12,6%

El proxy i la seva família



Una línia molt aprofitada

La línia amb Retenet cap als Estats Units, que es va contractar quan es va posar en marxa el Servei d'Accés Remot, també està essent molt aprofitada, bàsicament per dos motius. El primer és la relació que s'estableix amb dos proxy dels Estats Units que són pares del CESCA, a més dels dos de RedIRIS (un per als dominis .com .net .edu .org, i l'altre, per tots menys aquests). Quan hi ha una petició, s'agafa el que està a menys distància, el que triga menys en arribar a la pàgina que s'ha demanat. Per tal de triar entre una o l'altra opció, s'usa el *Internet Control Messages Protocol* (conegut com a protocol ICMP).

En segon lloc, la línia internacional s'usa també per anar directament a les planes més usades, que s'han d'anar a buscar directament a l'origen en el cas de planes que cap pare té guardades o que no es poden guardar en un *cache*.

L'experiència de l'agermanament, pensada per a nivells regionals, és experimental però està donant molt bon resultat

Germans (digests)
CESGA
CICA
EHU
Rcanaria
UCLM
UJI
Uniovi
UPV
UV

Fills
ECM (UB)
UAB
UPC
Blanquerna (URL)
XTEC
HGV
ICM
IMS
SCS

“Ens centrem en el camp de la biologia molecular, però amb la voluntat de treballar en la interfase entre mètodes computacionals i experimentals”

El premi Ciutat de Barcelona d'Investigació Científica 1998 ha anat a parar a mans del doctor F. Xavier Avilés. Tot i que la menció era, inicialment, a nivell personal, ell ressalta que el mèrit no és només seu i ha fet extensiu el guardó al grup de recerca que dirigeix a l'Institut de Biologia Fonamental (IBF) i al Departament de Bioquímica de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB). El jurat, format

per Lina Badimon, Xavier Estivill, Adolf Tobeña, Sebastià Serrano i Jordi Sargatal, els ha concedit el premi “pels seus treballs en enginyeria de proteïnes i especialment pels seus estudis en biologia molecular experimental i computacional que han permès caracteritzar diverses proteases i els seus inhibidors”. Es tracta d'una recerca que pot tenir una notable repercussió en aplicacions biomèdiques i agrònòmiques.



JORDI PARETO

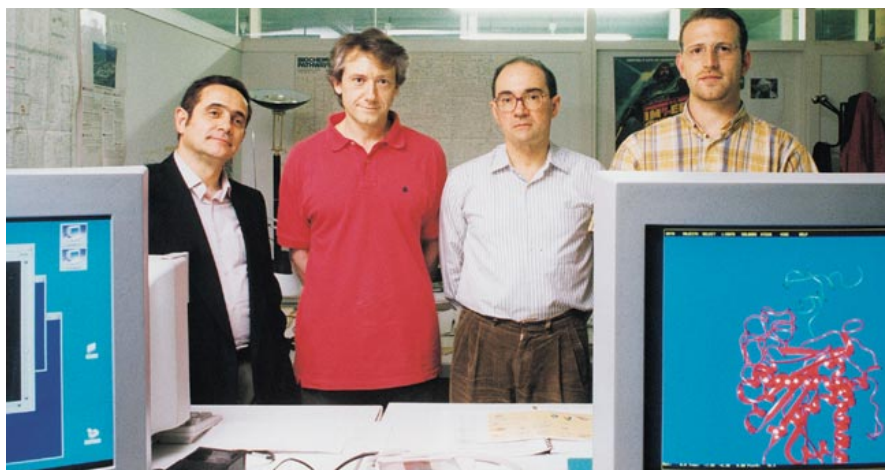
El premi que vostè ha rebut a nivell personal s'ha convertit en una menció col·lectiva a un grup de recerca. Per què?

Crec que ha de quedar clar que aquest premi és, en el fons, un premi de grup. Això no va en contra de les normes de la convocatòria perquè d'altres vegades s'ha permès que una persona representi a un grup o departament. El reconeixement es basa, principalment, en la productivitat que hem tingut en els últims anys, sobretot en l'any 1998, que hem fet un bon nombre de publicacions en revistes internacionals. I això no s'hagués pogut assolir sense un grup nombrós al darrera i sense col·laboracions internacionals.

Quin grup de recerca està més directament vinculat amb la investigació guanyadora?

La UAB és qui ha posat totes les infraestructures per fer la recerca a través de l'Institut de Biologia Fonamental (IBF) i el Departament de Bioquímica. Sobretot hi ha treballat la unitat d'Enginyeria de Proteïnes que està formada per quatre laboratoris, tres a l'IBF i un al Departament. Aquesta unitat, de la qual sóc coordinador, es pot adscriure d'una forma unitària al Centre de Referència en Biotecnologia, que és un centre virtual creat per la Generalitat de Catalunya per estimular el desenvolupament de la investigació bàsi-

El doctor F. Xavier Avilés, a l'IBF.



JORDI PARETO

F. Xavier Avilés, B. Oliva, E. Querol i P. Aloy, part del grup premiat.

ca i aplicada a Catalunya en el camp de la biotecnologia.

Quanta gent forma el grup d'investigació?

El gran grup, són unes 30 persones, un terç d'elles dedicades a col·laboracions amb empreses. Els qui treballen directament en biocomputació som entre 5 i 8 persones.

El premi rebut, tot i valorar el treball del grup, és per una investigació en concret?

Les principals protagonistes de l'estudi són les proteïnes, i dins d'aquestes te-

nim una especial dedicació als enzims que trenquen proteïnes i glúcids i als inhibidors d'aquests enzims. Dóna la casualitat que aquestes molècules estan implicades en un seguit de fenòmens biològics que són molt importants, alguns d'ells en patologies, com poden ser les inflamacions, la proliferació viral o la proliferació cancerosa. Nosaltres estem aprofitant aquests coneixements per, col·laborant amb algunes indústries, trobar variants d'aquestes molècules que siguin adequades per estudiar aquests aspectes importants per a la salut i per a desenvolupar fàrmacs.

Les aplicacions futures són únicament en el camp de la medicina?

No necessàriament. Hi ha un altre camp amb possibilitats: utilitzar els inhibidors de proteases per protegir els vegetals contra els atacs dels insectes. El que fem, juntament amb d'altres grups amb qui col·laborem, és introduir per enginyeria genètica (transgènia) diversos inhibidors de proteases en vegetals. Això fa que aquests creïn una resistència nova o més alta contra l'atac de determinats insectes. Un cas paradigmàtic són patateres modificades, que quan es posen en presència de l'escarabat de la patata, aquests insectes no se les mengen encara que tinguin gana.

Què té d'especial la metodologia que ha usat la unitat que vostè coordina a l'hora de fer la investigació?

Nosaltres ens centrem en el camp de la biologia molecular, caracteritzant i redissenyant proteïnes, però no només apliquem tècniques experimentals sinó també computacionals. Potser en dels aspectes i diferenciadors en el nostre treball és que tenim la voluntat de treballar en la interfase entre mètodes computacionals i mètodes experimentals. La majoria de grups s'especialitzen en un o altre tipus de metodo-

L'Institut de Biologia Fonamental Vicent Villar i Palasí

L'Institut de Biologia Fonamental (IBF), creat el 1970 per la UAB, dins del recinte de l'Hospital de Sant Pau, i traslladat al Campus de Bellaterra el 1983, s'encarrega de la realització i promoció d'investigacions multidisciplinàries en els camps de la biologia fonamental, de les ciències biomèdiques i de la biotecnologia. A més, també porta a terme docència de postgrau i reciclatge en aquestes àrees.

L'IBF està organitzat en vuit grups de recerca: Biologia Molecular, Enzimologia/Enginyeria de Proteïnes, Citogenètica, Immunologia de la Reproducció, Immunologia Cel·lular, Microbiologia Ambiental, Microbiologia Aplicada i Neu-

roquímica. A part, disposa de serveis addicionals: el Servei de Seqüenciació de Proteïnes, el Servei de Biocomputació (unit al primer a nivell de Campus) i el Servei de Cultius Cel·lulars. El personal científic dels diferents grups de recerca està format bàsicament per doctors i per estudiants de tercer cicle. Pel que fa a la producció científica, a l'IBF s'estan desenvolupant nombrosos projectes finançats per organismes nacionals (CICYT, DGESIC, FISS...) i internacionals (EU, NATO...) i per col·laboracions amb empreses (CDTI, PETRI, FEDER...), principalment farmacèutiques / biomèdiques, veterinàries i mediambientals. Això ha donat

lloc a nombroses publicacions d'alt índex d'impacte (46 el 1998), tesis doctorals (9 el 1998) i patents/kits diagnòstic (6 el 1998), entre d'altres.

Al mateix temps, l'Institut ofereix serveis científicotècnics en els seus camps d'activitat. Entre ells, en el camp de la biocomputació, un banc de dades genètiques i de biomolècules i l'anàlisi, predicció i simulació de biomolècules i de fàrmacs per ordinador.

Actualment treballen a l'Institut unes 80 persones, però s'espera que amb un projecte d'ampliació de les instal·lacions que s'està estudiant, es pugui doblar o triplicar el seu personal.

logia. Nosaltres fem les dues coses perquè ens hem ajuntat un grup prou nombrós d'investigadors i perquè creiem que ens pot donar uns resultats innovadors. En el context del CESCO, els mètodes computacionals que usem són de diversos tipus: alguns exigeixen poca potència computacional (mètodes gràfics d'anàlisi topològica, estadístics) i d'altres n'exigeixen molta (càlculs semiempírics i de dinàmica molecular).

Quin paper tenen els mètodes computacionals en el vostre treball?

Ens serveixen per poder endinsar-nos més fàcilment i ràpidament en la caracterització i enginyeria de proteïnes i lligands. Un dels nostres objectius consisteix a generar variants d'aquestes molècules redissenyades (més actives, o minimitzades, més fàcils de produir), que travessin membranes, que no tinguin efectes tòxics, etc. Per a poder fer tot això hem de conèixer la seva estructura, si hi ha formes semblants a la naturalesa i els mecanismes de plegament i funcionals que hi ha darrera. Aquí els mètodes computacionals són de gran ajut: comparació de seqüències, topologies i conformacions, modelatge, simulació dinàmica i de plegament, encaix de lligands i fàrmacs. Un exemple és una proteïna que hem trobat en patates que antagonitza factors de creixement i té propietats antitumora-

ls: la volem redissenyar per a potenciar aquestes propietats i minimitzar-la.

També ens dediquem a predir computacionalment l'estructura i funció de proteïnes descobertes en els grans projectes d'anàlisi de genomes. Cal però, reconèixer que freqüentment els mètodes computacionals aplicats a grans proteïnes encara no són prou precisos com per poder generar resultats que encaixin quantitativament amb dades experimentals. Sortosament afinen cada vegada més i ens ajuden molt perquè ens faciliten la comprensió de molts sistemes naturals, alguns no accessibles experimentalment.

La investigació que està portant a terme la unitat d'Enginyeria de Proteïnes servirà com a base per a quin tipus d'investigacions futures?

Intentem desenvolupar nous mètodes d'anàlisi i enginyeria de proteïnes que després apliquem a casos concrets. Al mateix temps, aprofitem l'experiència profunda obtinguda sobre aquestes molècules i les utilitzem com a models per desenvolupar nous mètodes, sobretot computacionals. És a dir, ens autoalimentem. Creiem que aquest tipus d'investigació combinada es farà cada vegada més usual i útil, sobretot amb els grans projectes de genòmica estructural que estan en marxa. Esperem que la nostra experiència sigui útil al nostre entorn.

Publicacions

Algunes de les publicacions científiques del grup relacionades amb biocomputació aparegudes durant l'any 1998.

- ÁLVAREZ-SANTOS S., GONZALEZ-LAFONT A., LLUCH J.M., OLIVA B & AVILÉS F.X. "A Theoretical Study of the Role of Arginine 127 in the Water-promoted Mechanism of Peptide Cleavage by Carboxypeptidase A" (1998) *New J. Chem.* 319-325.
- BLANCO-APARICIO C., MOLINA M.A., FERNANDEZ-SALAS E., FRAZIER M.L., MAS J.M., QUEROL E., AVILÉS F.X. & DE LLORENS R. "Potato Carboxypeptidase Inhibitor (PCI), a T-knot Protein, is an Epidermal Growth Factor Antagonist that Inhibits Tumor Cell Growth" (1998) *J. Biol. Chem.* 273, 12370-12377.
- MARTI-RENOM M., STOTE R.H., QUEROL E., AVILÉS F.X. & KARPLUS M. "Refolding of Potato Carboxypeptidase Inhibitor (PCI) by Molecular Dynamics Simulations with Disulfide Bonds Constraints". (1998) *J. Mol. Biol.* 284, 145-172.
- MARTI-RENOM M., OLIVA B., QUEROL E. & AVILÉS F.X. "Effects of Ionic Strength and Volume on the Simulated Dynamics of Solvated Proteins. Application to the Activation Domain of Porcine Pancreatic Procarboxypeptidase B". (1998) *Protein Engineering* 11, 881-890.
- ALOY P., MOONT G., GABB H. A., QUEROL E., AVILÉS F. X. & STERNBERG M. J. E. "Modeling Repressor Proteins Docking to DNA". (1998) *Proteins* 33, 535-549.

PROGRAMES DE MOBILITAT

Thomas Wiehe, del **Institute for Molecular Biotechnology** (Alemanya), va arribar a Barcelona el 8 de febrer convidat per Ferran Sanz, de l'IMIM (UPF), per desenvolupar el projecte *Finding Genes and Determining Gene Structure and Function by Comparative Analysis of Homologous Genomic Sequences*. Wiehe va marxar el 26 de març.

Katrin Gaedt, de la **Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf** (Alemanya), està entre nosaltres des del passat 1 de març per treballar en el projecte *Computer-assisted Modelling of Cytochromes and their Interactions with Pharmacologically Interesting Substrates*. Gaedt va venir convidada per Ferran Sanz, de l'IMIM (UPF), i es quedarà fins al 31 d'agost.

Rui Manuel Carvalho, de la **Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto** (Portugal), s'està entre nosaltres del 21 de març al 17 de juliol convidat per Xavier Oliver, del RMEE (UPC). Carvalho treballa en el projecte *Hydration and Aging of Concrete Simulation for Large Structures via Supercomputation*.

Panagiotis Adamidis, de la **Universität Stuttgart** (Alemanya), va arribar el passat 1 d'abril convidat per Eugenio Oñate, del CIMNE (UPC), per treballar en el projecte *Development and Validation of Parallel Computing Tools for Mould Filling and Solidification in Casting Processes*. L'investigador s'estarà entre nosaltres fins al 31 de juliol.

Dario de Fazio, de la **Università di Perugia** (Itàlia), ha vingut convidat per Antonio Aguilar, del Departament de Química-Física de la UB, per treballar en el projecte *Reactive Scattering by Hyperquantization*. De Fazio va arribar el 4 d'abril i marxarà el 31 d'octubre.

La fibra arriba a la UAB

La Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) es connecta a l'Anella Científica mitjançant fibra òptica des del passat dimarts 4 de maig i, per tant, ha deixat d'usar el radioenllaç que feia servir fins ara. La distància entre la UAB i el primer node SDH de la xarxa del Centre de Telecomunicacions de la Generalitat de Catalunya és de 27,5 quilòmetres. Aquest és el tram en què s'utilitzen dues fibres òptiques exclusives per a la UAB.

El canvi de connexió —i per tant el moment en què les comunicacions van estar tallades— es va fer en dos minuts a la franja horària del migdia, que era la que afectava menys quantitat d'usuaris.

Deixant de banda el mitjà de connexió, s'han patit pocs canvis més: la velocitat continua essent de 34 Mbps, i el commutador ATM i el router són els mateixos que s'usaven quan estava en funcionament el radioenllaç. La instal·lació de la fibra ha suposat, de fet, poca obra visible: s'ha hagut d'obrir uns quants metres de rasa i s'han instal·lat dues arquetes al campus de la Universitat. Això és degut al fet que, en gran mesura, s'ha usat la galeria de serveis de què ja disposava la UAB per fer l'estesa de fibra.

En la instal·lació tenien competència dues entitats diferents: d'una banda el Centre de Telecomunicacions, que s'ha encarregat d'estendres la fibra òptica seguint el traçat dels Ferrocarrils de la Generalitat de Catalunya (FGC); de l'altra el Servei Informàtic de la UAB, que ha dirigit la fibra per galeries, canalitzacions i edificis. A més a més, la fibra, per arribar fins als nodes de Barcelona, ha passat també per Cerdanyola del Vallès on també s'ha hagut de fer instal·lació.

Actualment, a més de la UAB —que té 36.893 estudiants—, es connecten a l'Anella Científica mitjançant fibra òptica les següents institucions: FCR, UB, UPC, UPF, UOC, URL, XTEC i CESCA.



1. Davant l'edifici del Servei Informàtic de la UAB també s'ha instal·lat una arqueta per realitzar la connexió.



FOTOS: JORDI PARETO



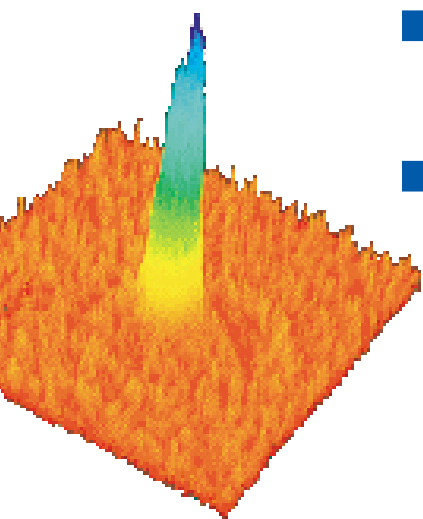
2. Un dels ponts de la Universitat, al llarg del qual transcorre la fibra òptica.

3. L'estació dels Ferrocarrils de la Generalitat a la UAB. Al terra es pot observar la tapa d'una de les arquetes que s'hi han instal·lat.

El Centre Informàtic General de Catalunya també jubila el seu radioenllaç

El Centre Informàtic General de Catalunya S.A (CIGC-SA) també ha canviat recentment el radioenllaç que usava per una connexió a través de fibra òptica a 2 Mbps. El canvi es va produir el passat 6 de maig. El CIGC-SA és el centre encarregat de pro-

porcionar accés a la xarxa corporativa de la Generalitat. Aprofitant el desplegament de la Xarxa Quatre, el Centre de Telecomunicacions de la Generalitat està intentant que tots els centres de l'Administració catalana tinguin connexions mitjançant fibra òptica.



Líquids i quàntics

L'any 1995 es va crear el Centre de Física de Benasc amb l'objectiu de reunir investigadors qualificats durant un període relativament llarg de temps perquè poguessin discutir el seu treball i establir noves col·laboracions.

Enguany, aquest centre ha passat a anomenar-se Centre de Ciències de Benasc en haver-se creat una fundació, amb finalitats idèntiques, impulsada per la Diputació General de Aragó i l'ajuntament de Benasc.

L'ajut econòmic inicial necessari per a dur a terme les primeres cinc sessions ha estat aportat, principalment, per Iberdrola S.A., l'ajuntament de Benasc (Osca) i la Universitat de Barcelona. No hauria estat possible portar una elit de científics durant tres setmanes al Pirineu Aragonès sense l'existència d'un sistema informàtic potent, que ha estat subministrat per Silicon Graphics. El CESCA ha col·laborat en aquest projecte des de la primera edició del Centre, assegurant una connexió punt a punt entre Barcelona i Benasc, donant així accés a Internet perquè cada científic pugui treballar amb els seus propis ordinadors.

L'edició del centre d'enguany tindrà lloc del 4 al 24 de juliol i estarà dedicada a un tema de notable interès científic: els líquids i gasos quàntics. Els directores científics de la reunió seran el professor M. Lewenstein, de la Universitat de Hannover i el professor Y. Castin, de l'École Normale Supérieure de París.

Sens dubte, una gran part de les discussions se centraran en els condensats de Bose-Einstein, predits per Satyendra Nath Bose i Albert Einstein. Aquests condensats van ser realitzats el 1995 per un grup encapçalat per Eric Cornell (National Institute of Standards and Technology a Boulder, Colorado), Carl Wieman (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) i Michael Anderson (University of Colorado, Boulder) en refredar uns 2.000 àtoms de rubidi a temperatures de l'ordre dels 100 nanokelvins. Durant uns 10 segons els àtoms perdien la seva individualitat i es comportaven com si fossin un "superàtom" (*Science* 269, 198 [1995]). En condicions de temperatura ambient, els àtoms dels gasos es dispersen pel recipient on es troben. Alguns es mouen a gran velocitat i altres estan pràcticament en repòs.

Portant més enllà un treball de Bose, Einstein va demostrar el 1925 que, si es refredava suficientment una mostra d'àtoms, una gran part passaria

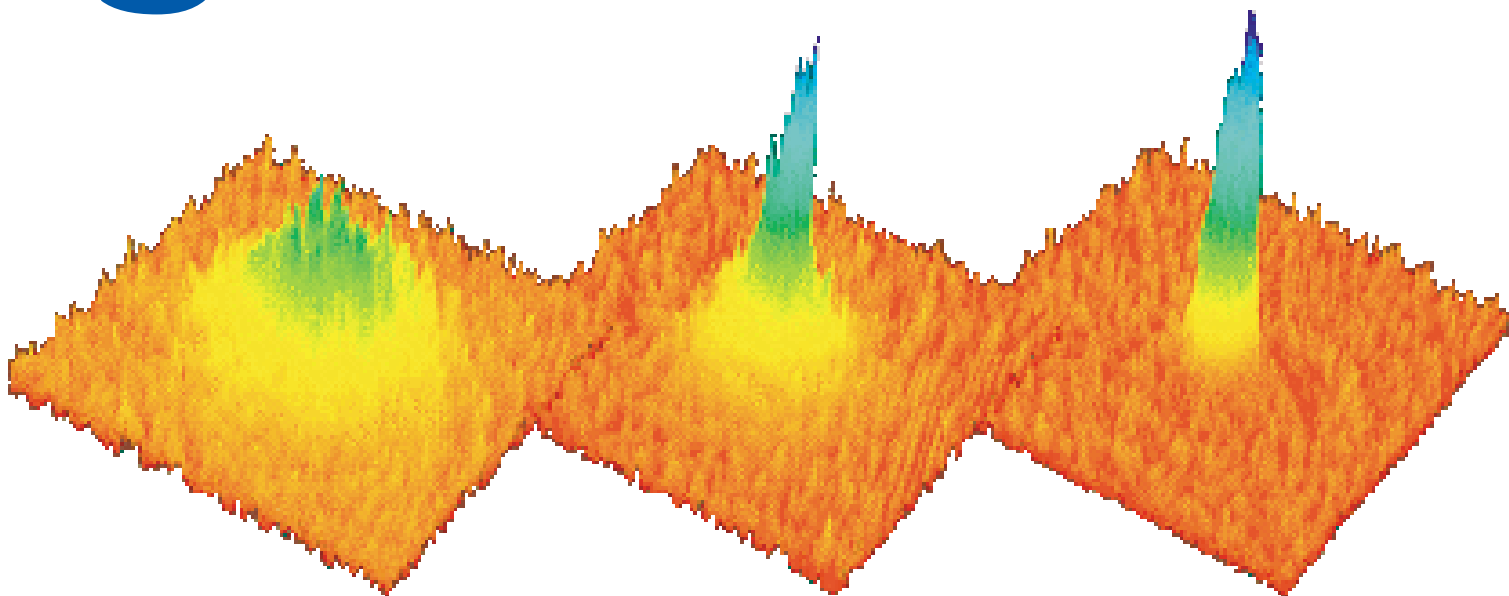
a l'estat d'energia més baixa possible i aleshores les seves funcions d'ona individuals, que descriuen d'acord amb la mecànica quàntica els estats de cada un dels àtoms, es fondrien en una única funció d'ones macroscòpica. En els condensats de Bose-Einstein la naturalesa ondulatòria de cada àtom està en fase amb la dels altres. Per aconseguir aquestes temperatures tan extraordinàriament baixes va ser necessari refredar els àtoms de rubidi mitjançant làsers i utilitzar després trampes magnètiques per a una evaporació controlada.

En el mateix any 1995 un grup de MIT encapçalat per Wolfgang Ketterle va aconseguir un condensat de Bose-Einstein en àtoms de sodi, i dos anys després Randall Mulet i el seu grup de la Universitat de Rice ho van aconseguir amb àtoms de liti. Més recentment, al juny de 1998, el grup liderat per Thomas Greytak i Daniel Kleppner del MIT van veure un condensat d'àtoms d'hidrogen a una temperatura

gasos

Pere Pascual i José I. Latorre

Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria.
Universitat de Barcelona



La institucionalització del Centre, feta l'estiu passat, permetrà en el futur ampliar el nombre de reunions i el seu abast temàtic

de 50 microkelvins i amb una densitat d'uns 1.015 àtoms/cm^3 , amb un total d'uns cent milions d'àtoms condensats.

Els diferents grups de treball d'arreu del món estan ja estudiant tota mena de propietats del condensat de Bose-Einstein. És potser curiós esmentar un recent experiment on s'ha fet passar llum a través d'un condensat de sodi. El resultat és espectacular: la llum viatja a 17 metres per segon! Aquest fenomenal alentiment de la velocitat de propagació dels fotons no és més que un primer exemple dels resultats que aniran produint-se. Segons els experts, s'ha obert la porta a la creació de feixos d'àtoms coherents (làsers d'àtoms, en lloc de fotons), és a dir, constitueixen el primer pas del que serà el nou camp de l'òptica atòmica no lineal. El desenvolupament paral·lel de la nanotecnologia pot combinar-se amb noves tecnologies realment revolucionàries. Podeu trobar més informació sobre aquest tema a: <http://amo.phy.gasou.edu/bec.html/>

Distribució de velocitats abans i després de la transició de Bose-Einstein. Per sota de la temperatura crítica els àtoms es condensen cap a velocitat zero (pic de la figura de la dreta).

El Centre de Ciències de Benasc té ja en projecte l'organització per l'any vinent de la reunió central de la Computació i Comunicació Quàntica. Aquest tema va reunir a l'edició de l'any 1998 una seixantena d'especialistes que han decidit repetir l'experiència pirenaica. El Centre té vocació de donar suport a iniciatives per a organitzar reunions de grups d'alt nivell investigador. En aquest sentit la institucionalització del Centre, feta l'estiu passat, permetrà en el futur ampliar el nombre de reunions i el seu abast temàtic.

MÉS INFORMACIÓ SOBRE EL CENTRE

<http://sophia.ecm.ub.es/>

Aula de Primavera

21 de juny, de 9.30 a 13.30 h
Introducció a la Supercomputació
M. Huguet (CESCA)

29 i 30 de juny, de 9 a 13 h
Entorn de Supercomputació
Í. Bàrcena (CESCA)

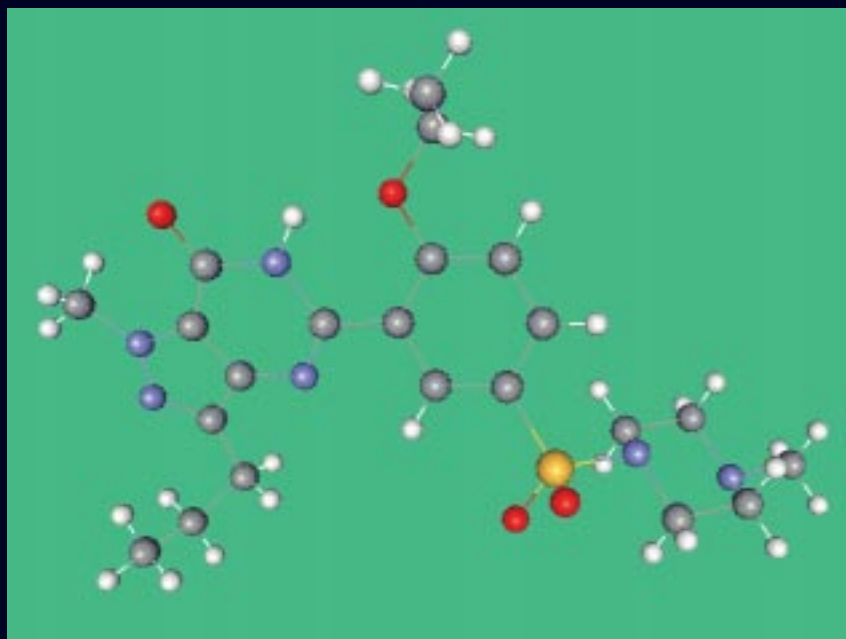
8 de juliol, de 9 a 13.30 h
IPng, el protocol d'Internet de pròxima generació
J. Abella (URL)

12 de juliol, de 9 a 14.30 h i de 16 a 18 h
Polítiques de seguretat informàtica i anàlisi de riscos
V. Huerta (UPC)

F O T O / N O T Í C I A

La imatge d'aquest mes mostra el principi actiu de la Viagra (Citrat de Sildenafil). La Viagra és un inhibidor selectiu de la guanosina monofosfat cíclic (cGMP) fosfodiesterasa específica tipus 5 (PDE5) i està indicat pel tractament de les disfuncions erèctils.

Es tracta d'una de les demostracions que es van poder veure al seminari de presentació del programa de visualització i modelatge molecular WebLab MedChem Explorer de Molecular Simulations Inc. (MSI) per optimitzar el disseny de fàrmacs. La jornada es va celebrar el passat 22 d'abril i va constar de dues parts: al matí hi va haver una presentació i a la tarda, demostracions diverses i una sessió pràctica amb l'ajuda de dos professors de MSI. Durant la sessió també es va fer una presentació d'Addlink, l'empresa organitzadora de l'acte, que es va celebrar a l'Edifici Annexus del CESCA.



Edita

CESCA

AMB EL SUPORT DE



Generalitat
de Catalunya



FUNDACIÓ
CATALANA
PER A LA
RECERCA

Universitat de Barcelona
Universitat Autònoma
de Barcelona
Universitat Politècnica
de Catalunya
Universitat Pompeu Fabra
Universitat de Girona
Universitat Rovira i Virgili
Universitat de Lleida
Universitat Oberta
de Catalunya
CSIC

TERAFLOP

DIRECTOR

Miquel Huguet

COORDINADORA

Alicia Martínez

REDACCIÓ

Mònica Tudela

DISSENY I PRODUCCIÓ

Subirà & Associats

CESCA

Gran Capità, 2-4

08034 Barcelona

Tel. 93 205 64 64

Fax: 93 205 69 79

<http://www.cesca.es>

teraflop@cesca.es

DIPÒSIT LEGAL: B-33512-94

ISSN: 1134-6671