

## *Bitácora@ Pioneros*

### **Los inicios de la química seca en nuestra Facultad**

*Breve repaso del camino científico-docente trazado por la Prof. Dra. Adriana B. Pierini, investigadora pionera en el área de la Química Computacional.*

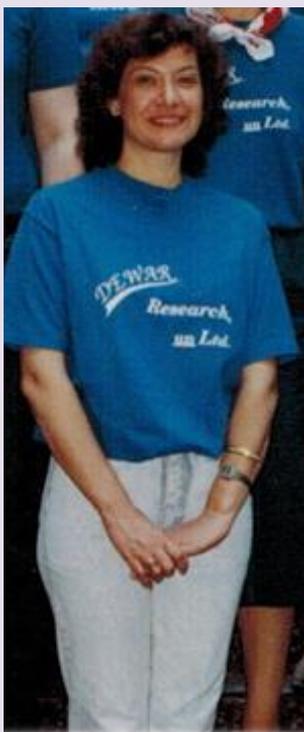
**Por Marcelo Puiatti y Liliana B. Jiménez**

*Cientos de egresados de nuestra Facultad podrían recordar, algunos con mayor detalle que otros, a aquella profesora de química orgánica que con tono suave y cálido explicaba los contenidos de la asignatura con excelente calidad docente. Ella era Adriana Pierini, querida y reconocida Profesora, que no sólo formó a profesionales en los ciclos iniciales de la carrera, sino que sentó los primeros ladrillos de lo que en el futuro, hoy es una importante disciplina en nuestra Facultad, la Química Computacional. Adriana falleció un 29 de julio de 2016, a los 63 años, luego de luchar incansablemente contra un cáncer determinante.*

*En esta nota, se repasará su carrera como científica, llevada adelante con mucha pasión, su incansable tarea como docente-formador, y su labor a nivel Institucional. En cada segmento de su vida ha abordado cada tarea con responsabilidad, conducta y ética intachables.*

**Carrera Científica.** Luego de sus estudios de educación secundaria en Río Tercero, se recibió en 1974 de Licenciada en Química Orgánica, en la Facultad de Ciencias Químicas (FCQ) de la Universidad Nacional de Córdoba (UNC), y desde aquel momento se dedicó de manera incansable y perfeccionista a la Química Orgánica. Comenzó al año siguiente su formación doctoral bajo la tutela del Prof. Dr. Roberto A. Rossi, en el Departamento de Química Orgánica de la FCQ. En 1979, la Casa de Trejo le otorga el título de Doctora en Química Orgánica, con la máxima calificación de *Sobresaliente*. Es durante esta etapa que se despierta su interés por la Química Computacional. A finales de ese año, con curiosidad científica, Adriana decidió continuar su formación profesional en la Universidad de Texas, en la ciudad de Austin, Estados Unidos, bajo la dirección del Prof. Dr. Michael J. S. Dewar, pionero en el desarrollo de métodos semi-empíricos.<sup>1</sup>

En Austin, ella cultivó el principio de **desarrollar los estudios teóricos de reacciones orgánicas de la mano de los resultados experimentales adquiridos de manera simultánea**. Este precepto ha regido su carrera hasta su adiós. Tal es así, que a su regreso, y con los años, creó y dirigió a una nueva línea de investigación dentro del Dpto. de Química Orgánica de la FCQ, con el nombre de "Modelado Computacional de Sistemas Orgánicos y Bio-Orgánicos. Relaciones Estructura-Reactividad. Aplicaciones al Diseño Experimental y la Síntesis Orgánica".<sup>2</sup>



1980. Adriana en su estadía posdoctoral en Austin, Universidad de Texas.

A su regreso, en el año 1981, el Departamento de Química Orgánica se encontraba ubicado en el sótano del Pabellón Argentina, donde actualmente funcionan laboratorios de los Departamentos de Físicoquímica y Química Biológica. En aquel período, los primeros cálculos teóricos se realizaron en una computadora ubicada en la Facultad de Ciencias Económicas, un equipo IBM modelo 1130.<sup>3</sup> Se trataba de una máquina con 16 Kb de memoria RAM, 2Mb en un disco único, una impresora de consola de 15 caracteres por segundo, una lectora de tarjetas y un teclado de consola. Para tener una noción de la capacidad de esta computadora se podría pensar en que, por ejemplo, una canción en formato mp3, de aproximadamente 3 Mb, sobrepasaría la capacidad de almacenamiento de aquel disco. ¡Una nota tan sencilla como ésta pero impresa en aquella impresora hubiese requerido más de 3 horas! Son considerablemente destacables los progresos científicos realizados y transitados en aquel momento, y a su vez, éstos construían las bases de la Química Computacional en nuestra Facultad. Algo más de 25 años

después, Adriana estaba involucrada en la adquisición de lo que fue *Cristina* (en honor a la Dra. Cristina Giordano, pionera en la investigación en fisicoquímica en la FCQ), la primera supercomputadora del Centro de Computación de Alto Desempeño de la UNC.<sup>4</sup> Ésta fue puesta en funcionamiento en marzo de 2010 en la ciudad de Córdoba y en su momento la más rápida del país (560 núcleos Intel Xeon 5420, 1,1 terabyte de RAM, un disco duro de 32 terabyte y una potencia de 4,7 teraflops).

Su extensa labor en investigación se define, en general, como el estudio de estructura-reactividad dirigido a la síntesis de compuestos orgánicos, aplicando para ello la química computacional. Sin embargo, desde comienzos de este nuevo siglo, se dedicó junto a los Dres. Vera y Puiatti a incursionar en el estudio de las interacciones sustrato-proteína, estudiando moduladores de la P-glicoproteína (importante proteína relacionada con mecanismos de resistencia a múltiples drogas, MDR),<sup>5</sup> inhibidores de acetilcolinesterasa (proteína empleada como blanco de compuestos con potencial actividad contra el Mal de Alzheimer), entre otros sistemas.<sup>6</sup> Además de ser parte de dos Tesis doctorales (Dres. Gabriel E. Jara y José Luis Borioni), éstos fueron los inicios en la investigación en el área de la **biología computacional** en su grupo de investigación.<sup>7</sup> Esto le permitió posteriormente colaborar en distintas tesis realizadas en otros grupos de esta Facultad.

Cuenta con una fructífera producción científica, la cual es avalada con más de 90 publicaciones en revistas internacionales y cuatro capítulos de libros en el área. Asimismo, su nombre estuvo presente en un gran número de conferencias y reuniones científicas nacionales e internacionales, específicamente como conferencista invitada, lo cual siempre la enorgullecía. Merecidamente obtuvo diversos premios durante su carrera que distinguieron su calidad científica, como por ejemplo el Premio Konex al Mérito en Ciencia y Tecnología por el área de Química Orgánica, otorgado en el año 2013.

**Labor Institucional.** Se destacó en distintas sociedades químicas tanto en el rol de socia como integrante de comités evaluadores y organizadores de eventos, especialmente es recordada en la Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica por su activa participación. En esta Sociedad fue Presidente del Comité Organizador del XVIII SINAQO, realizado en noviembre del 2011,<sup>8</sup> Vicepresidente y Presidente de la Sociedad en los períodos 2009-2011 y 2011-2013, respectivamente.

De la misma manera se involucró en tareas de gestión en nuestra Facultad, fue Vicedecana en el período 1994-1996, e integrante del Honorable Consejo Directivo de la misma en diversos períodos como representante de distintos claustros. Su tarea de gestión llegó hasta el Honorable Consejo Superior de la UNC donde ocupó un cargo de Consiliaria.

Cabe mencionar su labor en la creación de la entonces Unidad Docente de Matemáticas de la FCQ, lo que hoy corresponde al Departamento de Química Teórica y Computacional, ubicada en aquellos momentos en un entpiso del edificio Pabellón Argentina. Fue la Directora del mismo entre los años 1990 a 1996. También se involucró en actividades internas del Departamento de Química Orgánica, siendo Directora en distintos períodos.

Además de su participación simultánea en las actividades académicas y de gestión institucional, a lo largo de su carrera fue miembro de comisiones asesoras en CONICET, Agencia Córdoba Ciencia, SECyT-UNC y CONICOR.



2011. XVIII SINAQO, Villa Carlos Paz.

**Labor Docente.** En lo que respecta a enseñanza de grado, desde el año 1983, en que se integra al claustro de Prof. Regulares, se ha encargado de transmitir su experiencia y conocimiento en el área de la Química Computacional en las asignaturas Orgánica VI y Química Orgánica Computacional. A partir del año 2009, y en concordancia con los avances científicos comenzó con el dictado de la asignatura Modelado Molecular de Sistemas Orgánicos y Bio-orgánicos, en la carrera de Licenciatura en Química. Si bien Adriana no llegó a participar en el dictado de la nueva carrera de Biotecnología, participó activamente en el armado de su programa, impulsando la inclusión de la asignatura Bioinformática y Biología Computacional.

Además de otras asignaturas impartidas en el Departamento de Química Orgánica, ha dejado su huella en alumnos de grado mediante la dirección de diez tesinas de grado.

La pasión por la docencia también se plasmó en su activa participación en el dictado de curso de posgrado, los cuales no sólo fueron dictados en Córdoba (5), sino que también en distintas localidades del interior de país (Bahía Blanca, Neuquén, Río Cuarto, Rosario), en Latinoamérica (Brasil y Colombia) y hasta en Japón, en la Universidad de Kyushu, en el año 1993. La enorgullecía cómo sembraba inquietudes y curiosidades en esta disciplina, a tal punto de que con el tiempo se generaban nuevos grupos

de investigación en el área de la Química Computacional en estos nuevos lugares.

Su calidad docente indiscutible se trasladó también hacia jóvenes licenciados en lo que respecta a su formación en la Carrera Doctoral, con nueve tesis finalizadas y todas sobresalientes. La excelencia que buscaba en la formación de sus discípulos se puede destacar en las posiciones que han alcanzado, 4 Prof. Investigadores que forman el cuerpo actual de nuestra Facultad y del CONICET, un Prof. Investigador en la Universidad Nacional de Mar del Plata y dos Investigadores en compañías Farmacéuticas de los Estados Unidos, cumpliendo tareas en el diseño de drogas asistido por modelado molecular.

Finalmente, recordamos a Adriana a través de su ejemplo, asimilado por quienes la conocían como una perseverante, obstinada e incansable docente-investigadora, una mente inspiradora y pionera.

### Referencias

1- Luego de estudiar diversos sistemas orgánicos de manera experimental, M. Dewar se volcó al desarrollo de la química teórica aplicada al estudio de mecanismos de reacción, caracterizando principalmente, estructuras y energías de estados de transición de reacciones orgánicas. En la década de los años 70, Dewar perfeccionó los métodos semi-empíricos como MINDO, MNDO, AM1 y PM3. Para mayor detalle: Thiel, W. *WIRES Comput. Mol. Sci.* **2014**, *4*, 145–157.

2- El nombre actual de la línea de Investigación en el Departamento de Química Orgánica es "*Síntesis Orgánica asistida por Modelado Molecular.*" Se encuentra dirigida por su primera discípula, la Prof. Dra. María T. Baumgartner.

3- [https://es.wikipedia.org/wiki/IBM\\_1130](https://es.wikipedia.org/wiki/IBM_1130). Último acceso: 20-11-2018

4- <http://ccad.unc.edu.ar/equipamiento/cristina/>. Último acceso: 20-11-2018

5- Jara, G. E.; Vera, D. M. A.; Pierini, A. B. *J. Mol. Graph. Model.* **2013**, *46*, 10.

6- a) García, M. E.; Borioni, J. L.; Cavallaro, V.; Puiatti, M.; Pierini, A. B.; Murray, A. P.; Peñéñory, A. B. *Steroids* **2015**, *95*. b) Puiatti, M.; Borioni, J. L.;

Vallejos, M.; Cabrera, J. L.; Agnese, M.; Ortega, M. G.; Pierini, A. B. *J. Mol. Graph. Model.* **2013**, *44*, 136.

7- Por definición, **biología computacional** es el desarrollo y la aplicación de métodos de análisis de datos, métodos teóricos, modelado matemático y técnicas de simulación computacional para el estudio de sistemas biológicos. Por otro lado, la **bioinformática**, según una de sus definiciones más sencillas, es la aplicación de tecnologías computacionales y la estadística a la gestión y análisis de [datos biológicos](#). Sin embargo, los términos bioinformática y [biología computacional](#) han sido considerados como sinónimos en el pasado.

8- Es recordada con gracia la anécdota sucedida en el congreso de 2011, en la ciudad de Villa Carlos Paz, donde el detallismo impecable que la caracterizaba resaltó cuando decidió entregar paraguas como *souvenir*, los cuales ¡fueron empleados 4 de los 5 días del evento!