

## Química Teórica: investigadores del IMIT llegan a la frontera del conocimiento

Con asombro y expectativa sobre los resultados concretos del trabajo realizado dentro del área de la Química teórica o Física Molecular, un selecto grupo de científicos de todo el mundo recibió la presentación de una teoría/metodología que viene siendo desarrollada desde hace más de 8 años por investigadores del Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (IMIT) (UNNE-CONICET).

Especialistas en Química Teórica, Dinámica molecular, Materia Condensada, Física de Materiales y sus aplicaciones

Biológicas congregados en el 59° Sanibel Symposium organizado por la Universidad de Florida (USA), siguieron con interés la descripción de una herramienta teórica que permite predecir y analizar propiedades electromagnéticas (denominadas de respuesta) en átomos y moléculas. Esta teoría es muy precisa y permite predecir fenómenos que nunca antes fueron mencionados a nivel mundial.

El doctor Gustavo Aucar- único investigador superior del CONICET en el NEA, docente del Departamento de Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura de la UNNE y director del IMIT- es quien estuvo a cargo de la presentación del trabajo al que describe como un desarrollo teórico, que permite avanzar en la descripción de fenómenos que amplían la frontera del conocimiento.



La comunidad científica considera que el trabajo desarrollado por los investigadores del IMIT amplía la frontera del conocimiento

Lo que el equipo de investigadores del IMIT logró es obtener lo que se conoce como “propagadores de polarización relativistas” expresados a partir de “integrarles de camino” la que es uno de los lenguajes en los que se expresa la física cuántica.

Hay que insistir en un concepto: lo realizado por los investigadores locales consiste en el desarrollo de una teoría que permite entender mejor algunos fenómenos físico-químicos que no son perceptibles a simple vista, y por ende son difíciles de ser comprendidos según nuestros esquemas mentales usuales.

Algo de esto explica lo expresado por algunos de los expertos que asistieron al Simposio realizado en la Universidad de Florida, que ubicaron al trabajo de los científicos del IMIT en la “frontera del conocimiento”, es decir un lugar de avanzada y en donde se están dando los primeros pasos.

Entrelazamiento cuántico. Existen tres lenguajes utilizados para describir la física cuántica. Se trata de los formulados por Erwin Schrödinger; Werner Karl Heisenberg y Richard Feynman. Todos expresan lo mismo, pero de manera diferente.

Para el desarrollo de la teoría y metodología buscada, Aucar y su equipo hicieron uso del lenguaje de Feynman y lo utilizaron para derivar unas propiedades de respuesta novedosas en átomos y moléculas que están muy vinculadas con el “entrelazamiento cuántico”.

El entrelazamiento cuántico es una de las propiedades más “extrañas” de la física cuántica y que expresa, en términos prácticos, lo siguiente: si se efectúa una observación o una medición en un lugar dado del universo, la experiencia puede afectar a lo observado en otro lugar del universo de manera instantánea, aunque no se sepa. Es uno de los conceptos que sustentan la computación cuántica.

“Hasta el momento esta propiedad era explicada con un formalismo que permitía describir ese entrelazamiento con fenómenos relacionados con la función de onda (entrelazamiento entre estados electrónicos por ejemplo), pero no a algo relacionado con propiedades de respuesta como el acoplamiento entre espines nucleares, o la medida de cuanto influye un campo magnético sobre un sistema. El

nuevo tipo de entrelazamiento, nunca antes propuesto, explicaría como se transmite la información a nivel intramolecular.

El gran hallazgo de los investigadores del IMIT es haber encontrado luego de 8 años de trabajo, una expresión que se puede adaptar para evaluar la probabilidad, por ejemplo, de que las excitaciones debidas a dos espines nucleares dentro de una misma molécula estén entrelazadas y eso explique lo que luego se mide mediante alguna espectroscopía particular. Dicho de una manera más práctica, no existía hasta el momento ni metodología, ni herramientas físico-matemáticas que permitieran explicar y evaluar el entrelazamiento entre espines nucleares dentro de una molécula, y los investigadores locales lo hallaron.

Para hacer más entendible el concepto convendría explicar lo que es un “espin”. Se trata de una propiedad intrínseca de algunos núcleos atómicos o de partículas elementales como el electrón. Otras propiedades intrínsecas son la carga y la masa. Están allí con ellos y uno puede usar de ellas para saber más de sus propiedades. El hecho de que algunos núcleos atómicos posean espín no nulo hace a que los mismos puedan reaccionar de modos predecibles cuando se los somete a los campos magnéticos externos.

*“Esta teoría es muy precisa y permite predecir fenómenos que nunca antes fueron mencionados a nivel mundial”*

En la práctica es la existencia de espines nucleares en moléculas de agua lo que hace que uno pueda observar las imágenes de resonancia con las que se evalúan los estados de sustancias blandas del cuerpo humano.

Otro logro. Un modelo derivado de la teoría antes mencionada permitió además introducir descripciones matemáticas que introducen efectos de electrodinámica cuántica al estudio de la resonancia magnética nuclear.

La resonancia magnética nuclear es una espectroscopía lisa y llana. Al interactuar la materia con la radiación se obtienen espectros que permiten describir tipos de moléculas que lo

conforman o reacciones intramoleculares que se producen, como así también una serie de fenómenos que se generan en el interior de la materia y no son perceptibles a simple vista.

Hasta el momento no se había podido introducir la electrodinámica cuántica a esos estudios, y con la metodología alcanzada se logró.

Aplicación. La pregunta del millón es qué aplicación práctica tienen estos desarrollos teóricos. La respuesta del doctor Aucar es clara: “básicamente estamos hablando de nuevos conocimientos que permiten entender algunos fenómenos antes no descriptos adecuadamente y que pueden tener una aplicación concreta o no en el corto plazo, pero lo tendrán seguro en el futuro”.

De todas maneras formulaciones de este tipo podrían servir para el desarrollo de interruptores cuánticos de motores a escala nanométrica, es decir, nanotecnológicos. Otra aplicación podría darse en la computación cuántica, con la aclaración pertinente de que las implementaciones actuales en esa área, corresponde a planteos teóricos matemáticos formulados hace más de 40 años.

*"Hasta el momento no se había  
podido introducir la  
electrodinámica cuántica a esos  
estudios, y con la metodología  
alcanzada se logró"*

Pero el doctor Aucar al hablar de implementación práctica de teorías, prefiere ajustarse a lo que esgrime el físico Juan Roederer, una figura legendaria de la ciencia argentina y precursor del modelo de universidad científica, referente en la década del 60 en toda la región. “Si queremos saber por qué ocurren las cosas en el mundo geofísico, tenemos que ignorar las fronteras humanas. Probablemente esta fue la razón que me impulsó a pasar de la ciencia experimental a la teórica”.

Juan Monzón Gramajo