

Física Molecular: logran generalizar un modelo teórico formulado hace más de 50 años

Investigadores del Instituto de Modelado e Innovación Tecnológica (UNNE-CONICET) encabezado por el doctor Gustavo Aucar, lograron generalizar un modelo teórico formulado entre los años 50' y 64' por los científicos norteamericanos Norman Ramsey y Willis Flygare, referido a la Resonancia Magnética Nuclear (RMN).

Este logro tendrá un alto impacto en la comunidad científica, ya que abrirá el camino al estudio de nuevos fenómenos e interpretaciones de lo conocido en el área de la Física Molecular.

El aporte del doctor Aucar y su equipo fue el de ampliar este modelo teórico de modo que incluya a los átomos más pesados, es decir, los que están ubicados de la cuarta fila hacia abajo de la tabla periódica.

“Desde hace varias décadas la comunidad científica sabía que el modelo de Ramsey y Flygare no era adecuado para átomos pesados, pero nadie sabía cómo generalizarlo al régimen relativista”, comentó el doctor Gustavo Aucar.

“Varios grupos de científicos en todo el mundo han trabajado mucho buscando esta generalización y no la han encontrado. Por suerte nuestro equipo, junto a otro de Buenos Aires, y a partir de la tesis del doctor Agustín Aucar sobre la “Constante de Espín Rotacional”, encontramos la llave para desarrollar la generalización de la teoría que hoy estamos exponiendo a la comunidad científica”, expresó el también docente de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura de la UNNE.



El doctor Gustavo Aucar junto a los doctorandos Leonardo Millán, Teresita Santa Cruz, Patricia Blatter y Gabriela Aucar.

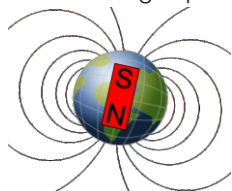
El modelo teórico de los norteamericanos es un modelo no relativista, y por tanto válido solo para moléculas que contienen átomos livianos (los que ocupan las primeras tres filas de la tabla periódica de los elementos).

Teoría de los norteamericanos. Cuando se utiliza esta técnica se obtienen dos parámetros: el acoplamiento entre pares de espines nucleares y el apantallamiento electrónico de los núcleos. Ambas propiedades son

indispensables para convertir a la RMN en uno de los instrumentos más potentes de la química, bioquímica y otras ramas de la ciencia. Al realizar un experimento con resonancia magnética, se genera un espectro que consiste en un conjunto de líneas que asumen la función de ser como las huellas digitales de una molécula. De ahí que con la espectroscopía de RMN se puedan identificar moléculas, determinar su estructura o estudiar procesos físico químicos, bioquímicos estáticos o dinámicos.

Ramsey y Flygare lograron algo muy complicado, *obtener los valores absolutos de los apantallamientos magnéticos mediante la medición de una constante que relaciona los espines nucleares con la rotación de la molécula, y el cálculo preciso de una parte del apantallamiento magnético*. Cada tipo de núcleo atómico tiene una escala absoluta propia.

-¿Cómo entender lo hecho por Ramsey primero y luego Flygare? . Hagamos un esfuerzo por imaginar que lo que ocurre en el mundo de los átomos y las moléculas puede ser explicado con lo que conocemos que ocurre en el mundo cotidiano. Si tuvieramos un imán y lo pusieramos en presencia de un campo magnético como el de la Tierra, por ejemplo, este se orientaría según puede verse en la figura:



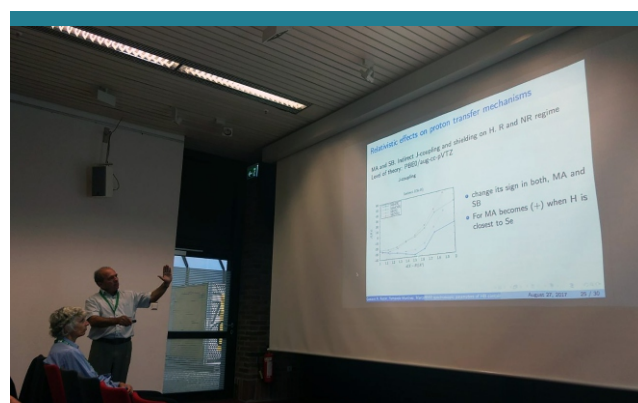
Se puede suponer que algunos núcleos pertenecientes a ciertos átomos cuentan con un “imán nuclear”, de modo que esos núcleos pueden interactuar con los campos magnéticos internos y externos. Los núcleos de esos átomos “se darán cuenta” cuando la molécula está en presencia de un campo magnético y reaccionarán orientándose de un modo particular. Si la molécula estuviera quieta, los electrones que rodean a esos núcleos reaccionarían al campo externo apantallando los núcleos. Ese apantallamiento se puede considerar como compuesto por dos partes: una del tipo diamagnético (produce campos opuestos a los externos) y otra del tipo paramagnético (produce campos que potencian los externos).

Por otro lado, si la molécula rotara los núcleos arrastrarían los electrones y ese movimiento de los electrones

produciría un campo magnético en la región de los núcleos y por lo tanto sus imanes “se darían cuenta” de la aparición de ese campo.

Estos dos campos distintos, el externo (producido por un aparato externo o la Tierra, por ejemplo) y el interno (debido a la rotación molecular) producen efectos diferentes en los sistemas moleculares. Estos efectos se pueden medir y al hacerlo se conocen propiedades internas e importantes de las moléculas.

Ramsey y Flygare lograron relacionar los efectos de ambos tipos de campo magnético (externos e internos) a través de una relación conocida como la regla de Flygare. Esa relación es válida cuando los átomos de las moléculas son livianos, pero deja de ser válida cuando esos átomos son pesados (pertenecientes a la 4ta, 5ta o 6ta fila de la Tabla Periódica).



El doctor Gustavo Aucar exponiendo la generalización del Modelo de Ramsey y Flygare.

Logro. La teoría generalizada fue presentada con gran repercusión por el doctor Aucar y su equipo en la ciudad alemana de Marbourg. El escenario fue el ideal, porque se trató de un Congreso Internacional de especialistas en física cuántica relativista, denominado REHE.

“Es una teoría que funciona muy bien para todos los sistemas moleculares en los que se probó hasta el momento”. El desarrollo abrirá las puertas a nuevos estudios sobre estructuras moleculares, introduce un nuevo término completamente relativista y sin interpretación física actual. Permitió además relacionar otras propiedades de un modo que no se había logrado hacer antes.

Juan Monzón Gramajo