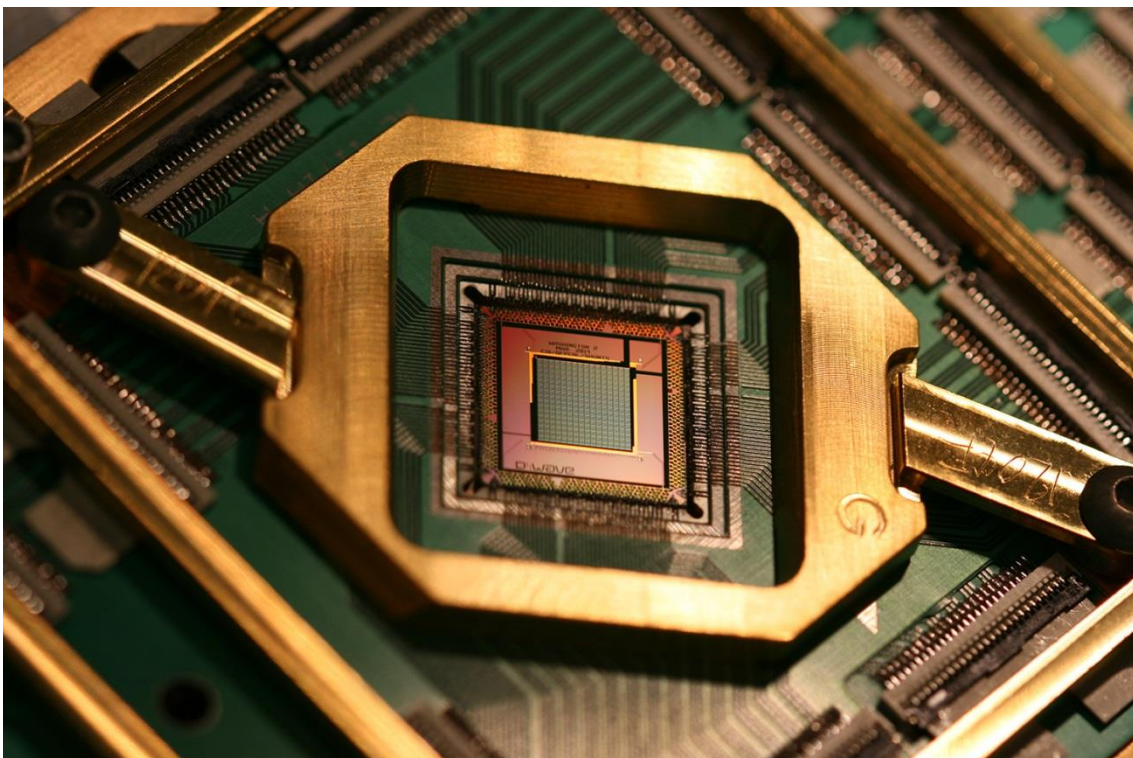


Madrid, lunes 11 de diciembre de 2017

Un estudio propone emplear ‘moléculas artificiales’ para conocer la dinámica de los procesos químicos

- El experimento emplea circuitos superconductores, que simulan las vibraciones moleculares emulando la interacción entre materia y radiación en una ‘molécula artificial’
- Los resultados, publicados en la revista ‘Physical Review Applied’, ayudarán a comprender ciertos procesos químicos



Dispositivo de la compañía D-Wave que ha inspirado los circuitos que se utilizarán en el experimento.

Un equipo internacional de investigadores liderado por el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) ha propuesto un experimento que empleará un circuito cuántico para simular la dinámica de cierto tipo de transiciones moleculares, como las que se dan en los procesos químicos. Mediante circuitos superconductores,

se simulan las vibraciones moleculares imitando la interacción entre materia y radiación en una *molécula artificial*.

El trabajo, publicado en la revista *Physical Review Applied*, propone cómo realizar un experimento cuyo desarrollo ayudará a entender las propiedades de cualquier molécula. Entender mejor estas propiedades conllevaría interesantes aplicaciones tecnológicas, desde catalizadores químicos, células solares y marcadores biológicos más eficientes, hasta identificar la presencia de hidrocarburos y otras moléculas orgánicas complejas en cometas, polvo interestelar e incluso en otros planetas.

“Cuando una molécula absorbe luz, ésta experimenta una modificación abrupta de su estructura electrónica”, explica el doctor Juan José García Ripoll, investigador científico del Instituto de Física Fundamental, del CSIC. “Como consecuencia de esto, los átomos se excitan y comienzan a vibrar. Este exceso de energía desaparece al cabo del tiempo en forma de luz emitida por la molécula, dejando un patrón muy particular, que es lo que conocemos como espectro de emisión. Es la huella dactilar de la molécula”, afirma Diego González Olivares, estudiante de doctorado en el mismo centro.

“El problema aparece cuando queremos simular estos procesos al modo clásico” explica Borja Peropadre, investigador del Instituto de Física Fundamental cuando se realizó el estudio. “La naturaleza cuántica de los átomos hace que las simulaciones clásicas se vuelvan muy ineficientes. Como consecuencia, resulta muy complicado inferir con exactitud qué es lo que sucede en el interior de una molécula, incluso al nivel de moléculas compuestas por pocos átomos”, añade.

“Este resultado permitirá arrojar luz sobre las propiedades espectroscópicas de nuevas moléculas hasta ahora desconocidas y mejorar nuestro conocimiento de muchas ya conocidas. Entender estas propiedades resulta fundamental para determinar tanto sus potenciales aplicaciones tecnológicas, desde catalizadores químicos, células solares y marcadores biológicos más eficientes, hasta identificar la presencia de hidrocarburos y otras moléculas orgánicas complejas en cometas, polvo interestelar e incluso en otros planetas”, concluyen los investigadores.

Moléculas artificiales

El equipo de científicos ha propuesto una alternativa para estudiar y entender estas transiciones eficientemente: “Los circuitos superconductores permiten reproducir la interacción a nivel cuántico entre átomos y luz con un altísimo grado de control”, afirma Olivares. “Debido a esto, es posible recrear las condiciones que se dan en una molécula durante una transición vibrónica y emular su comportamiento”.

Los científicos han encontrado que, al acoplar estos circuitos superconductores entre sí de forma adecuada, éstos pueden comportarse como los átomos en el interior de una molécula. Estas “moléculas artificiales”, como acceden a una superposición cuántica en un entorno altamente controlado, ofrecerían una riqueza de información adicional que no es accesible en mediante simulaciones clásicas.

Diego G. Olivares, Borja Peropadre, Joonsuk Huh, Juan José García Ripoll. **Quantum Emulation of Molecular Force Fields: A Blueprint for a Superconducting Architecture.** *Physical Review Applied*.
DOI: 10.1103/PhysRevApplied.8.064008