

Nota de Prensa

Pulsando un interruptor molecular

Un equipo internacional de investigadores en el que participa el Donostia International Physics Center (DIPC), ha presentado un novedoso método para accionar un interruptor formado por una única molécula aplicando una fuerza externa.

El trabajo publicado esta semana en *Nature Chemistry*, abre nuevas posibilidades para el estudio de la activación por medios mecánicos de moléculas individuales, procesos implicados en numerosas funciones biológicas importantes y clave en los futuros dispositivos moleculares.

(Donostia / San Sebastián, 4 de julio de 2016)

Todos sabemos que un dedo es suficiente para accionar el interruptor de la luz en la pared, pero, ¿qué se necesitaría si redujéramos dramáticamente el tamaño de ese interruptor hasta la escala atómica, la nanoescala?, es decir, ¿cómo podríamos pulsar o accionar un interruptor formado por una única molécula? Esta sencilla pregunta tiene que ver no solo con la ciencia más básica si no que también es fundamental para potenciales aplicaciones de futuros dispositivos moleculares.

Investigadores del Donostia International Physics Center (DIPC) de San Sebastián (País Vasco), el Fritz-Haber Institute de la Sociedad Max Planck (FHI-MPG) de Berlin (Alemania), la Universidad de Liverpool (Reino Unido) y la Academia Polaca de Ciencias de Varsovia (Polonia) han logrado con éxito activar de una manera controlada un "interruptor uni-molecular" con la fuerza ejercida por la afilada aguja o punta de un microscopio de barrido de última generación. Los científicos hace tiempo que eran capaces de activar interruptores moleculares con otros métodos, usando luz, calor o electricidad, pero ahora además, también pueden "pulsar" estos nano-interruptores, como si se tratará del interruptor de la luz, pero mucho más pequeño.

El estudio experimental y teórico, publicado hoy en la prestigiosa revista *Nature Chemistry*, demuestra que en moléculas orgánicas apropiadas depositadas sobre una superficie, es posible activar la transferencia de átomos de hidrogeno dentro de la propia molécula acercando una punta metálica afilada lo suficientemente cerca. "*Es como si tuvieras un pequeño interruptor que hace click clack cuando te acercas con un dedo atómico*" nos cuenta Thomas Frederiksen, Profesor Ikerbasque en el Donostia International Physics Center (DIPC) - UPV/EHU. Esta reacción de transferencia de hidrógenos, llamada *tautomerización*, es muy importante en química orgánica y biología molecular, y además es un fenómeno muy interesante para el desarrollo de dispositivos electrónicos moleculares.

Los investigadores han podido cuantificar la fuerza necesaria para operar su diminuto interruptor – una molécula de porphycene sobre una superficie de cobre, y también han demostrado que el accionamiento solamente puede inducirse situando la punta en unas posiciones muy concretas sobre la molécula. Y todo ello, con una resolución espacial de la fracción de la longitud de un enlace químico, hablamos de una medida de cincuenta mil millones de veces más pequeña que un metro. Asimismo, han comprobado la importancia de la reactividad química de la punta de la aguja en este proceso inducido por fuerza, ya que han observado que la molécula no puede activarse cuando en la punta de la aguja se sitúa un átomo individual de Xenón – un elemento inerte que no posee la reactividad química necesaria.

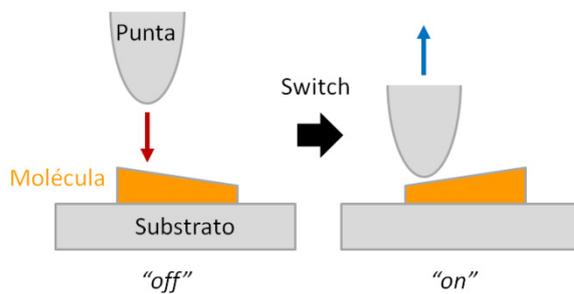
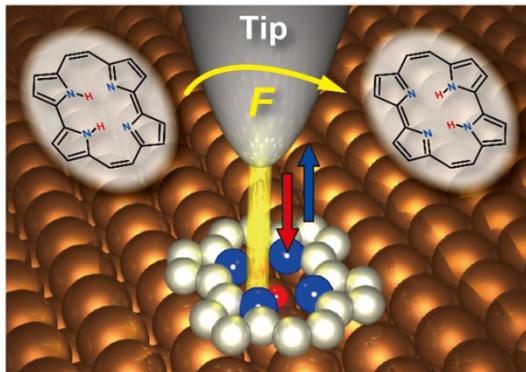
Takashi Kumagai del FHI-MPG, el ideólogo de este estudio, construyó el innovador experimento que combina un microscopio de fuerza atómica con uno de barrido túnel donde una aguja oscilante se aproxima a unas pocas distancias atómicas de la molécula. El accionamiento se observa con un característico cambio en la frecuencia de oscilación según se aproxima la punta, confirmado también con un cambio en la imagen atómica generada simultáneamente al escanear con la punta la molécula.

El equipo de investigadores también ha realizado un exhaustivo análisis teórico mediante simulaciones por ordenador para tratar de entender el mecanismo a nivel atómico detrás de este accionamiento inducido por fuerza. Las simulaciones realizadas han reproducido los resultados experimentales, permitiendo hacer una descripción del proceso. Thomas Frederiksen explica que *"nuestros cálculos han revelado que la tautomerización, es decir el accionamiento del interruptor, ocurre porque la barrera energética de la activación del proceso se reduce a medida que acercamos la punta metálica. Sin embargo, cuando usamos una punta terminada en un átomo de Xenón el comportamiento cambia drásticamente y no se induce la tautomerización, debido a que la punta es inerte"*.

En las conclusiones de este trabajo los investigadores recalcan que la reacción inducida por fuerza que han estudiado, al implicar cambios en los caminos reactivos se asemeja a una etapa elemental en los procesos catalíticos. Por eso, estos resultados aportan una nueva estrategia para obtener un conocimiento más profundo a nivel atomístico de las reacciones catalíticas, y se dirigen a un nuevo control de la química a nivel atómico.

Referencia publicación:

Force-induced tautomerization in a single molecule. Janina N. Ladenthin, Thomas Frederiksen, Mats Persson, John C. Sharp, Sylwester Gawinkowski, Jacek Waluk, and Takashi Kumagai, *Nature Chemistry* (2016). DOI: [10.1038/nchem.2552](https://doi.org/10.1038/nchem.2552).



Pie de figura:

Representación esquemática del accionamiento de un interruptor molecular formado por una molécula de porphycene sobre una superficie de cobre. El "encendido" del interruptor se produce mediante la fuerza ejercida por una afilada punta metálica.

Nota:

Los medios interesados en ampliar información o solicitar entrevistas pueden contactar con Nora Gonzalez en el teléfono 943 015624 / 699936816 o en nora.gonzalez@ehu.eus.