

Un 'selfie' molecular muestra cómo se rompe un enlace químico

Científicos del Instituto de Ciencias Fotónicas y otros centros internacionales han conseguido monitorizar dónde se sitúan los átomos de una molécula, el acetileno, mientras se ioniza, un proceso casi instantáneo. De esta forma han podido observar por primera vez cómo se rompe uno de sus enlaces carbono-hidrógeno y se libera un protón.

ICFO

21/10/2016 11:54 CEST

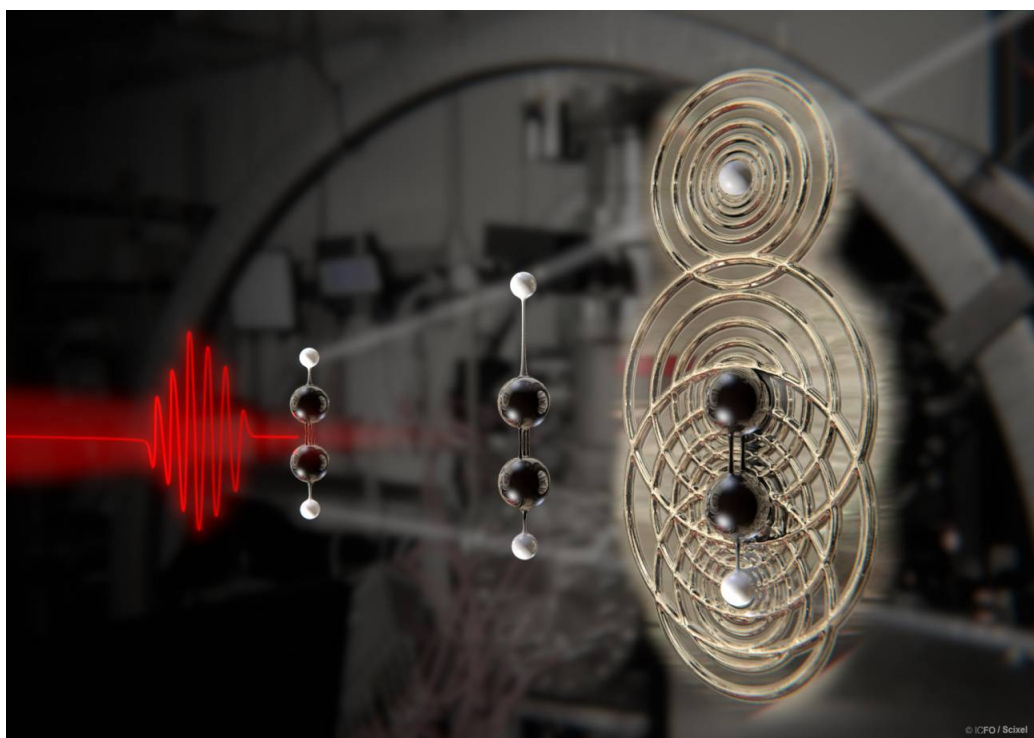


Ilustración de la ruptura de un enlace carbono-hidrógeno en el acetileno (C₂H₂) mediante la técnica de difracción electrónica inducida por láser. / ICFO/Scixel

Imagínense lo que sería poder observar cómo los átomos individuales de las moléculas se reordenan durante una reacción química para formar una nueva sustancia, u observar los componentes del ADN moviéndose, reorganizándose, e incluso replicándose. Este poder daría una visión sin precedentes para comprender y potencialmente controlar estos procesos.

La simple idea de poder ver como se rompen las moléculas, o se

transforman durante las reacciones químicas, hasta ahora, había sido algo inalcanzable, ya que requiere seguir todos los átomos que constituyen una molécula, con una resolución temporal de pocos femtosegundos (1 femtosegundo = 1 millonésima de una billonésima parte de un segundo), así como una resolución espacial subatómica.

Es el primer experimento en el que se visualiza directamente la ruptura del enlace y la expulsión del un protón

Conseguir imágenes casi instantáneas con una resolución espacio-temporal combinada para visualizar una reacción molecular era considerado hasta ahora ciencia ficción. Hace exactamente 20 años, una de las ideas propuestas tomo en cuenta el uso de los propios electrones de la molécula para fotografiar su estructura, es decir, enseñarle a la molécula a hacerse un *selfie*. La idea era brillante, pero imposible de aplicar, hasta hoy.

En un estudio reciente, publicado en la revista *Science*, los científicos del grupo de Attociencia y Óptica Ultra-rápida del Instituto de Ciencias Fotónicas (ICFO, en Barcelona), en colaboración con investigadores de los EE UU, Países Bajos, Dinamarca y Alemania, informan sobre la obtención de imágenes de la ruptura de un enlace molecular de acetileno (C_2H_2) nueve femtosegundos después de su ionización.

El equipo ha logrado realizar un seguimiento de los átomos individuales de una molécula aislada de acetileno con una resolución espacial de hasta 0,05 Ångström (una resolución más pequeña que el ancho de un átomo individual)- y con una resolución temporal de 0,6 femtosegundos. Incluso, fueron capaces de desencadenar la ruptura de un solo enlace de la molécula y ver cómo un protón era expulsado de la misma.

"Nuestro método ha conseguido finalmente la resolución espacial temporal necesaria para poder tomar imágenes instantáneas de la dinámica molecular sin perder ninguno de sus eventos, y estamos ansiosos por probarlo en otros sistemas moleculares como catalizadores químicos y sistemas biorelevantes", comenta Jens Biegert, profesor ICREA en el ICFO y líder de la

investigación.

Enseñar a una molécula a hacerse un selfie

El equipo fabricó una fuente de láser ultrarrápido en el infrarrojo medio, con tecnología puntera en el mundo, y lo combinó con un microscopio de reacción para detectar los momentos de distribución en 3D de electrones e iones en plena coincidencia cinemática. Se orientó una sola molécula aislada de acetileno en el espacio con la ayuda de un láser de pulso corto. Luego, se utilizó un pulso infrarrojo lo suficientemente fuerte para liberar un electrón de la molécula, se aceleró este electrón con una trayectoria de retorno y se le obligó a dispersarse sobre su la molécula ionizada de origen, todo ello ocurriendo en sólo nueve femtosegundos.

Se han obtenido imágenes de la ruptura de un enlace molecular de acetileno nueve femtosegundos después de su ionización

Benjamin Walter, también investigador del ICFO y coautor del trabajo explica: "La trayectoria de vuelo y la energía cinética de los fragmentos de colisión se registraron con el microscopio de reacción similar a como se realiza en un gran experimento de física de partículas."

Tras un meticuloso e ingenioso procesamiento de datos, el equipo fue capaz de extraer toda la estructura molecular y demostrar que la orientación de la molécula a lo largo del campo eléctrico del láser, o perpendicular a ella, cambiaba completamente su dinámica. Para una orientación, la molécula se sometió a movimiento vibracional con el campo de láser, mientras que para la otra orientación, se produjo una clara ruptura de un enlace C-H. Este es el primer experimento en lograr tener una visualización directa de la ruptura del enlace y una observación del protón durante su expulsión de la molécula ionizada $[C_2H_2]^{2+}$, algo que nunca se había visto antes.

"Tomamos un electrón, lo condujimos a lo largo de una trayectoria específica con el láser y lo dispersamos sobre una molécula aislada para observar y registrar su patrón de difracción", señala Biegert, "es sorprendente poder

imaginar y comprender las escalas de tiempo y longitud del experimento".

Los autores destacan la importancia de la cooperación que ha hecho posible este avance, logrado con las aportaciones de científicos teóricos y experimentales, físicos atómicos y químicos cuánticos del ICFO, de Kansas State University, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Physikalisch Technische Bundesanstalt, Center for Free Electron Laser Science/DESY/CUI, Aarhus University, Friedrich-Schiller University Jena, Leiden University y la Universität Kassel.

Referencia bibliográfica:

B. Wolter, J. Biegert et al. "Ultrafast electron diffraction imaging of bond breaking in di-ionized acetylene". *Science*, 21 de octubre de 2016.

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

ATTOCIENCIA

REACCION QUÍMICA

OPTICA

BIOLOGÍA MOLECULAR

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)