

Artículos reseñables

Selectivity in single-molecule reactions by tip-induced redox chemistry

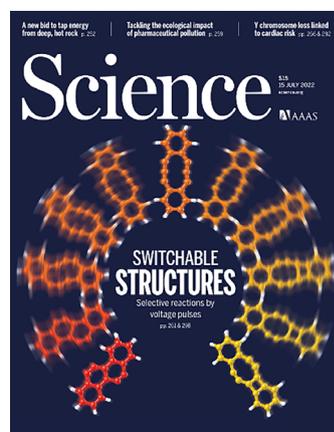
Science, **2022**, 377, 298-301

Selectividad en reacciones de moléculas individuales mediante química redox inducida por la punta

F. Albrecht, S. Fatayer, I. Pozo, I. Tavernelli, J. Reep, D. Peña, L. Gross.

En 1959, Richard P. Feynman predijo, en su famosa charla *Plenty of Room at the Bottom*, que algún día sería posible crear moléculas individuales *a la carta* ensamblando los átomos a voluntad. Recientemente, este grado de control sobre el mundo molecular se ha demostrado en parte posible, después de que un grupo de investigadores liderados por Diego Peña, del Centro Singular de Investigación en Química Biológica y Materiales Moleculares (CiQUS) de la Universidad de Santiago de Compostela y Leo Gross, de IBM Research Zurich, hayan descrito la formación y ruptura selectiva de enlaces covalentes en moléculas individuales depositadas sobre superficie. Estas transformaciones químicas fueron inducidas aplicando diferentes pulsos de voltaje con la punta de un microscopio de sonda de barrido, que se empleó además para visualizar las moléculas obtenidas con resolución sub-molecular. Este trabajo se ha publicado recientemente en la revista *Science* y se ha destacado en su portada.

Los investigadores partieron de moléculas del 5,6,11,12-tetraclorotetraceno, que se depositaron sobre una superficie de cloruro sódico. A continuación, se provocaron diferentes transformaciones en moléculas individuales inducidas mediante pulsos de voltaje en condiciones de ultra alto vacío, que dieron lugar a la formación de un diradical de fórmula $C_{18}H_8$ y caracterizado por un anillo central de diez miembros. Un pulso de voltaje adicional sobre este diradical indujo la formación de un enlace carbono-carbono transanular, dando lugar, bien a una estructura con un anillo de ocho miembros fusionado a otro de cuatro miembros, o bien a una estructura con dos anillos de seis miembros fusionados en el centro de la molécula. Sorprendente, estos reagrupamientos resultaron ser altamente selectivos, controlando la formación de uno u otro isómero estructural mediante la modulación en la amplitud del pulso del voltaje empleado. Además, invirtiendo la polaridad fue posible recuperar el diradical de partida en un proceso reversible. Cabría esperar que las tres especies

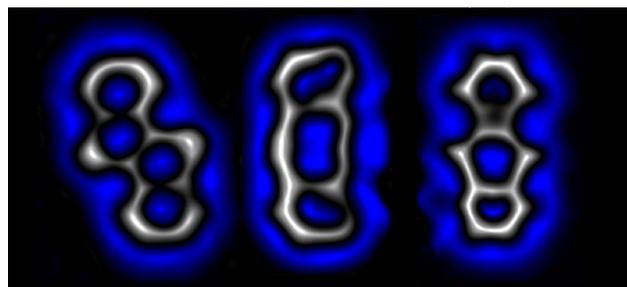


Portada de la revista que publica el trabajo reseñado.

moleculares involucradas en estos reagrupamientos fuesen extremadamente reactivas en condiciones ambientales, pero estos compuestos se pudieron caracterizar y manipular sobre superficie gracias al empleo de condiciones de ultra alto vacío y temperatura criogénica.

Estos avances demuestran el potencial de los microscopios de sonda de barrido de alta resolución para producir avances relevantes en

química y manipular de forma controlada moléculas individuales. Este es el objetivo del proyecto ERC *Synergy Grant* denominado MolDAM, donde se enmarca este trabajo. Cabe indicar que el trabajo comentado aquí mereció reseñas en *Chemistry World* y *El País*, entre otros medios.



Imágenes obtenidas mediante microscopio de fuerza atómica (AFM) de los isómeros estructurales con fórmula $C_{18}H_8$ involucrados en este estudio. Credit: IBM Research