

LA MICROSCOPIA DE CAMPO CERCANO PARA SEGUIR REACCIONES QUÍMICAS SOBRE SUPERFICIES

José Angel Martín Gago

Instituto ciencia de Materiales de Madrid-CSIC. C. Sor Juana Inés de la Cruz, 3. 28'49, Madrid. España.
Gago@icmm.csic.es

Sintetizar nuevas estructuras nanométricas o conectar moléculas orgánicas entre si (como pueden ser hidrocarburos policíclicos aromáticos, PAHs) de manera controlada sobre superficies es un primer paso para el desarrollo de la llamada electrónica molecular [1,2]. La síntesis sobre superficies se ha convertido en los últimos años en una herramienta importante para crear nuevas especies a partir de sus constituyentes más elementales. Así, nanoestructuras de diferente dimensionalidad pueden definirse “a la carta”, y ensamblarse de manera precisa sobre distintas superficies controlando parámetros como presión, temperatura y tiempo. Este procedimiento de formación de nuevos materiales mediante autoensamblado (*bottom-up*) permite no solo crear nanoestructuras nuevas, unidas de manera covalente y contralada, sino además obtener especies estables que no son accesibles mediante rutas químicas tradicionales.

El microscopio de efecto túnel (STM), o las imágenes de muy alta resolución de fuerzas atómicas (AFM) con puntas funcionalizadas tomadas in-situ y en condiciones de ultra alto vacío (UHV) se han convertido en una herramienta muy importante para seguir paso a paso estas reacciones químicas. Su capacidad para distinguir parámetros como los orbitales moleculares de las distintas especies los ha convertido en técnicas necesarias en este campo. Por otra parte, cálculos de primeros principios basados en el funcional de la densidad (DFT) nos permiten no solo optimizar las posibles estructuras formadas por las reacciones sobre superficies mediante minimización de la energía, sino también calcular cual es el aspecto esperado de una molécula particular en una imagen de STM o de fuerzas atómicas. Así el orbital molecular de la estructura molecular se convierte en un verdadero documento de identidad de la estructura que permite su identificación.

En esta presentación se mostrarán diferentes ejemplos de aplicación sobre superficies de monocristales, como puede ser cobre, oro o platino. Por una parte veremos como un proceso de competición en la deshidrogenación inter o intra-molecular puede dar lugar a la formación de fullerenos desde estructuras planas [3], a la síntesis de películas 2D [4], polímeros 1D o nanografenos[5]. Es decir, partiendo de un mismo precursor somos capaces de controlar la dimesionalidad de la estructura formada. Veremos también aplicaciones a distintos campos, como puede ser al origen de la vida, ya que algunas de estas reacciones químicas, o procesos similares a los del medio interestelar [6], fueron importantes para la emergencia de la vida en la Tierra, y estos entornos de UHV nos permiten reproducir o simular estas condiciones de manera controlada.

REFERENCIAS

- [1] López, M.F., (2011) “On surface synthesis of cyclic organic molecules”. *Chemical Society Reviews* 40, 4578-4590.
- [2] G. Otero et al. (2008) “Fullerenes from aromatic precursors by surface catalysed cyclodehydrogenation”. *Nature* 454, 865-868.
- [3] P. Merino et al. (2014) “Graphene etching on SiC grains as a path to interstellar polycyclic aromatic hydrocarbons formation” *Nature Communications* 5, 3054

AGRADECIMIENTOS

El grupo de investigación ESISNA agradece financiación de la Comunidad de Madrid MAD2D-CM; del ministerio español de economía y competitividad MAT2014-54231-C4-1P; de la unión europea mediante los proyectos: ERC-synergy ERC-Synergy grant NANOCOSMOS; Grant Agreement number “610256” y Graphene flagship- WP material Science

FIGURAS

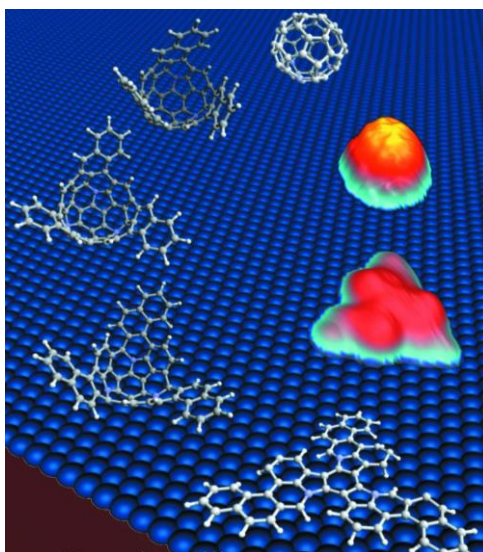


Fig. 1. Ciclodeshidrogenación de un hidrocarburo policíclico aromático para formar fulerenos, proceso seguido por STM [2]

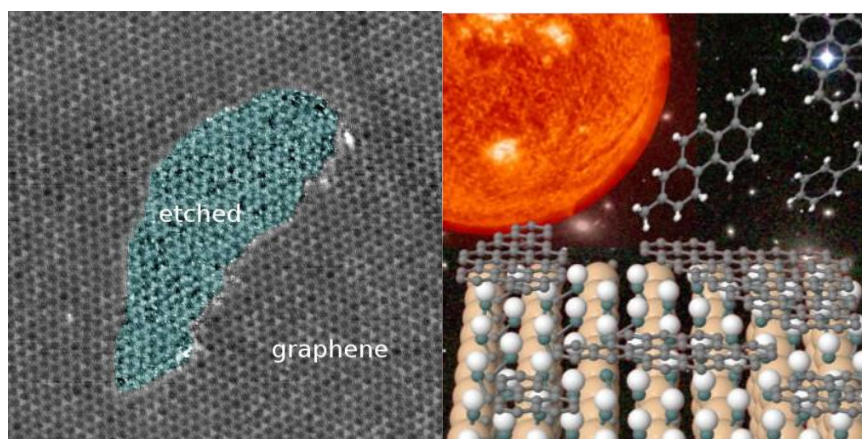


Fig. 2. Imagen de STM que muestra que el grafeno es atacado por hidrógeno atómico. En el espacio, cerca de las estrellas moribundas abundan tanto el hidrógeno atómico como granos de carburo de silicio, que están cubiertos por grafeno. Su interacción puede formar moléculas cíclicas como las que un día en la Tierra formaron la vida. [3]

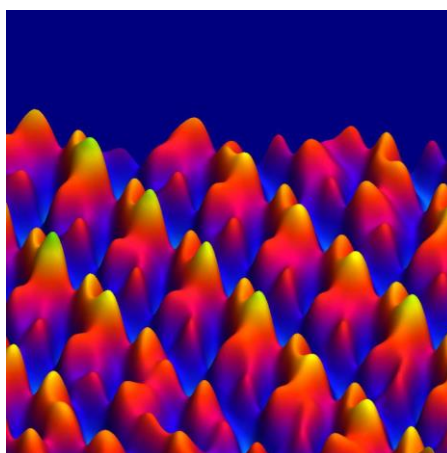


Fig. 3. Moléculas de prolina, un aminoácido, autoensambladas y autoorganizadas sobre la superficie de un metal. [1]