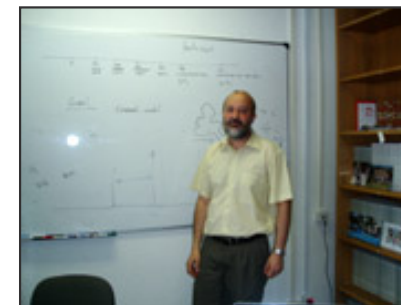


Universidad Autónoma de Madrid

El trabajo que nosotros hacemos con el láser, ver el movimiento de los electrones en las moléculas, está en la frontera de lo que la tecnología actual es capaz de producir

Fernando Martín es Catedrático del área de Química Física de la Facultad de Ciencias de la UAM y miembro del IMDEA Nanociencia

Por primera vez en la historia, un grupo de investigadores ha conseguido fotografiar el movimiento de los electrones dentro de las moléculas. Un avance cualitativo que deja abierta la puerta a una nueva rama de la ciencia con multitud de posibilidades: la atoquímica. Fernando Martín, ha sido el coordinador de la parte teórica de esta investigación. Él mismo nos cuenta en qué ha consistido y cómo se ha desarrollado su trabajo.



Fernando Martín

Montserrat Álvarez

Lo primero que quiere dejar claro Fernando Martín es que el enfoque de su trabajo es puramente teórico.

"Nosotros no hacemos experimentos sino que resolvemos ecuaciones, desarrollamos modelos teóricos que nos llevan a nuevas ecuaciones que solucionamos y a partir de ellas predecimos fenómenos que pueden ocurrir en la naturaleza. Por supuesto, siempre trabajamos en colaboración con grupos experimentales que son los que comprueban si nuestras predicciones son correctas o no".

La nanotecnología y los problemas de catálisis son dos de las grandes áreas de investigación en las que se ha especializado este catedrático y su equipo, compuesto por unas 15 personas. Pero hoy no nos ocuparemos de ellas, sino de una tercera línea de investigación que le ha permitido realizar uno de los estudios más importantes de los últimos tiempos y gracias al cual ha recibido el **Premio Nacional de la Real Sociedad Española de Química** hace menos de un mes. Nos referimos a la utilización de láseres ultracortos e intensos para conocer el comportamiento de los electrones dentro del núcleo molecular.

Los antecedentes: láseres de femtosegundos

"Creo- comienza su explicación nuestro protagonista de hoy- que todo el mundo sabe lo que es un láser, un haz de luz dirigida. Y que un láser normal, por ejemplo un puntero, emite luz de manera continua, es decir, suministra energía de manera continua, por ejemplo 1.000 w.

Bien, pues hace 20 años los investigadores empezaron a plantearse la posibilidad de emitir esa luz, no de manera continua, sino en *paquetitos*. Empezaron a pensar en un láser que disparara luz de forma intermitente, con una cierta frecuencia, *como una ametralladora*. Esto es lo que hoy conocemos como láseres pulsados, en los que cada emisión de luz es un pulso".

En realidad estos láseres lo que hacen es almacenar la energía y soltarla de golpe con una cierta frecuencia lo que va generando paquetitos de luz que tienen una energía muchísimo mayor. Así se consigue que un láser que, por ejemplo, emitiría 1000 w de manera continua, en estos breves instantes emita Megavatios o incluso Giga o Teravatios.

"Se trata de concentrar la energía en breves intervalos de tiempo para que tenga mayor potencia. Esto abre un sinfín de posibles aplicaciones como ya ocurre en medicina, si quieres rascar la córnea, por ejemplo, necesitas cierta intensidad para poder ir eliminando capas, o en metalurgia, para cortar materiales" nos aclara.

Pero, ¿cuánto duran estos pulsos? Aquí el profesor nos pide un esfuerzo de imaginación.

"Un segundo todos sabemos lo que es- continúa- bueno, pues un segundo en el mundo de los láseres es mucho, muchísimo tiempo. Los primeros láseres pulsados emitían pulsos de algo menos de un 1 microsegundo (10^{-6} = 0,000001 segundos), pero esto en realidad no es nada; aún así, date cuenta que los cronómetros que se utilizan para medir a los velocistas de las olimpiadas a lo más que han llegado es a medir milésimas (10^{-3} = 0,001 segundos).

Este tiempo inicial que duraban los pulsos de los primeros láseres, 1 microsegundo, es muy lento comparado con lo que emplean las partículas de las moléculas en moverse. Por ejemplo, en una molécula sencillita, la de hidrógeno (H_2) que nosotros hemos utilizado para nuestra investigación, los núcleos (en este caso protones), tardan del orden de 10 femtosegundos (un femtosegundo es 10^{-15} = 0,000000000000001 segundos) en moverse.

Pues bien, aunque parezca un tiempo tremendamente corto, que lo es, a finales el siglo XX se consiguió hacer láseres pulsados de femtosegundos con los que se podía ver el movimiento de los núcleos".

Para que lo entendamos mejor, el profesor Fernando Martín recurre al símil de una cámara fotográfica.

"Imagina que quieres filmar con una cámara cinematográfica a una persona que está andando (una cámara lo que hace es una secuencia de fotos, separadas por cortos intervalos de tiempo). Si al abrir el diafragma, que es cuando entra la luz, queda abierto mucho tiempo la imagen sale movida. Lo que tienes que hacer son fotos en intervalos de tiempo más cortos que los del movimiento del objeto que va a ser filmado. Por ejemplo, si quieres filmar el movimiento de una bala, tienes que sacar fotos con una apertura de diafragma de microsegundos o incluso menos.

Pues bien, si quieres ver el movimiento de los protones en la molécula de H_2 , necesitarás una cámara fotográfica cuyo diafragma se abra durante un tiempo inferior a 10 femtosegundos (tiempo de movimiento del protón), en caso contrario saldría una mancha, como una foto movida. Esa cámara es el láser pulsado. Es decir; si tu mandas un láser y durante unos femtosegundos ilumina lo que tu quieres observar es como hacer una foto que no está movida, porque el movimiento que estás intentando ver dura 10 femtosegundos pero tu abres el diafragma durante mucho menos tiempo. La sucesión de fotos de este tipo, obtenidas en intervalos de femtosegundos, produce la película del movimiento. Es un concepto similar al del cine, si quieres sacar películas de objetos en movimiento, tienes que abrir y cerrar el diafragma en mucho menos tiempo que lo que tarde en moverse ese elemento (en realidad, el concepto de hacer una foto con un láser es ligeramente más complicado, pero la esencia de la idea es la misma que en la fotografía convencional).

A finales del XX los investigadores fueron capaces de producir pulsos láser con duraciones del orden de femtosegundos y eso permitió ver el movimiento de los núcleos. Por eso le dieron el premio Nóbel a Ahmed H. Zewail en 1999, fue toda una revolución".

La molécula de hidrógeno H_2 está compuesta sólo por 4 elementos: 2 protones, (que están vibrando como un muelle) y 2 electrones (que giran en torno a los protones).

"¿Sabes porqué?"- me pregunta. Porque es como hacer una película en la que el protagonista es el núcleo y no Tom Cruise, le respondo. No le queda más remedio que sonreír y prosigue, "eso es, pero la importancia radica en que podemos ver las reacciones químicas que es cuando las moléculas cambian y dan lugar a un nuevo compuesto. Con este láser se pudo ver en acción cómo se producían las reacciones químicas."

Entonces gracias a ello, - apunto yo-, se puede intervenir en esas reacciones y modificarlas a nuestro antojo.

"Exacto, -concluye- de hecho hay toda una rama de la ciencia dedicada a ello, su nombre, *Coherent Control of Chemical Reaction*. ¿Qué ventajas tiene? Por ejemplo, queremos sintetizar un producto que llamaremos C; la naturaleza dice que para lograrlo hay que hacer reaccionar a A+B, pero resulta que B es un material carísimo o poco abundante; por eso, en lugar de utilizar B nos interesaría sustituir B por otro material, X, mucho más barato; pero claro la reacción de A+X no es C. Ahora, si tu eres capaz de ver todo lo que pasa a escala de femtosegundo, cuando estos núcleos se están reorganizando, eres capaz de intervenir y hacer que A+X reaccionen de manera que den lugar al producto que tu quieres, C.

¿Cuál es el resultado final? Que yo puedo producir lo que quiera de forma más eficaz y más barata. Es decir, que tiene aplicaciones inmediatas".

Un paso al futuro: ver también los electrones

Pero en todo este proceso advierto que nos hemos olvidado de las otras partículas que componen las moléculas, los electrones.

"Los electrones son unos elementos que giran alrededor de los núcleos (protones en el caso del H₂) y que son alrededor de 2.000 veces más ligeros, y por tanto se mueven de forma mucho más rápida. Los electrones tardan del orden de 100 atosegundos (10^{-18} = 0,000000000000000001 segundos) en dar una vuelta alrededor de los núcleos. La tecnología que consiguió generar pulsos de luz de sólo atosegundos es de hace 3 ó 4 años. Nosotros, en cuanto nos enteramos de este avance, pensamos que podría servir para hacer una película del movimiento de los electrones que hasta ahora no había sido posible. Por eso puedo afirmar que el trabajo que hacemos con este láser, ver el movimiento de los electrones en el núcleo molecular, está en la frontera de lo que la tecnología actual es capaz de producir".

Así contado parece fácil, pero nada más lejos de la verdad. Las primeras publicaciones acerca de esta nueva tecnología vieron la luz en 2002-2003, y el equipo de investigación de Fernando Martín comenzó a trabajar en su investigación en 2005.

"Llevamos muchos años trabajando. Fue un año o dos después del nacimiento de esta nueva tecnología cuando fuimos conscientes de sus posibilidades reales, antes no. Otros científicos al tener conocimiento de la aparición del láser de atosegundos tuvieron otras ideas diferentes a la nuestra que utilizarlo para hacer una película del movimiento de los electrones.

En teoría teníamos la herramienta para hacer esa película, pero no sabíamos si realmente era posible o no por los límites que impone el *Principio de Incertidumbre*.

Como estos proyectos son súper caros y llevan años de trabajo, no se puede hacer experimentos sin tener una idea previa de lo que se puede esperar de ellos, así que cogimos nuestras herramientas teóricas, las extendimos para que su precisión aumentara y fuéramos capaces de ver que ocurría en esa escala de tiempo; desarrollamos nuevos

métodos matemáticos, nuevos códigos computacionales cuya ejecución necesitó de más de un millón de horas de tiempo de cálculo en el Centro de Supercomputación de Barcelona *Mare Nostrum*. Todo ello con el objetivo de alcanzar la precisión necesaria; una vez lograda, utilizamos pulsos de atosegundos para ver que imágenes se observaban.

Eso es lo que hicimos, y lo que observamos es que, efectivamente, se puede ver el movimiento de los electrones, siempre con las restricciones que impone el *Principio de Incertidumbre*; es decir no se llega a ver su trayectoria limpia (como la de un coche, por ejemplo) pero sí vemos cómo se mueven los electrones en la molécula.

Posibles aplicaciones

Al igual que antes hablábamos de la posibilidad de manipular el movimiento de los núcleos que constituyen las moléculas para conseguir las reacciones que necesitamos, ahora podemos hablar también de intervenir en el movimiento de los electrones y, por tanto, en su comportamiento.

"La pregunta es- nos cuenta el profesor- si ésta es una posible puerta de entrada a una nueva disciplina que podríamos llamar la *atoquímica*, por extensión de la que venía desarrollándose hasta ahora, la femtoquímica.

Mi opinión es que sí, pero claro, esto tiene un problema y es que de momento es carísimo, no compensa. Pero lo mismo pasaba con la femtoquímica al principio. Luego, con el tiempo, las herramientas se fueron abaratando. La *atoquímica* no va a ser utilizable mañana, quizá tengamos que esperar 10 ó 15 años, pero seguro que en ese tiempo se van a dar avances tecnológicos que abaraten las herramientas y hagan más rentable su aplicación."

Llegado este punto no me queda más remedio que hacerle una pregunta que seguro ronda por la cabeza de todos aquellos que han leído este artículo: si hace 10 años a Zewail le dieron el Nobel por descubrir cómo ver el movimiento de los núcleos que componen las moléculas, ¿por qué no se lo van a dar ahora al que consiga hacer factible la *atoquímica*?

"Vamos a ver, a Zewail le dieron el Nobel pero no fue el único que hizo el trabajo. Zewail supo utilizar los láseres pulsados de femtosegundo para hacer algo inteligente con ellos, él y muchas personas más. Yo no sé si se lo darán a alguien en este nuevo campo, pero es una investigación que requerirá la participación de muchas personas, entre las que nos encontramos nosotros (ver final del artículo).

Además, ¿a quién se lo van a dar, al que hizo el primer láser de atosegundos o a quien lo ha utilizado para ver el movimiento de los electrones? Nunca se sabe. De lo que sí estoy convencido es que va a haber un Nobel en *atofísica* o *atoquímica*, desde luego no ahora, habrá que esperar 10 años o más para a ver si realmente esto nos conduce a algo; desde luego es un gran logro, pero a lo mejor resulta que luego tiene pocas aplicaciones porque conlleva problemas tecnológicos insalvables, como pasa por el momento con la energía generada por fusión termonuclear que, a pesar de los esfuerzos que se han hecho en los últimos 50 años, no termina de arrancar.

Nuevos retos

Para terminar me intereso por sus planes para el futuro.

"Pues ahora estamos haciendo lo que llaman *Trenes de atosegundos*. Hasta ahora lo que hemos utilizando es sólo un pulso de atosegundo del láser, el resto los eliminamos. Pero lo que de verdad hace un láser es generar *Trenes de*

El principio de incertidumbre determina que existen límites al conocimiento intrínsecos a las mismas leyes de la física.

pulsos de atosegundos. Por eso, ahora estamos jugando con la creación de trenes con vagones (pulsos) emitidos en diferentes intervalos de tiempo, más cercanos o más lejanos, trenes donde la distancia entre vagones es variable y los utilizamos como nuestra escala de tiempo para hacer la película.

Casi seguro que antes de finales de año o principios del que viene, haremos una publicación sobre el tema. Pero no somos nosotros los únicos; esta investigación la llevamos presentando en congresos desde hace un año y medio, por eso ya hay otros equipos que están trabajando en ello, con lo cual tenemos competencia".

Veremos en qué termina.

Protagonistas del trabajo:

Parte Teórica (artífices de los cálculos teóricos): Fernando Martín (coordinador), J.F Pérez-Torres (estudiante doctorado UAM). F. Morales (estudiante de doctorado UAM). José Luis Sanz-Vicario (investigador visitante en la UAM, procedente de la universidad de Antioquia).

Parte experimental: M.J.J Vrakking (coordinador) G. Sansone, F. Kelkensberg. M.F Fling, W.Siu, O. Ghafur, P. Johnsson, M Swoboda, E. Benedetti, F. Ferrari, F. Lépine, S. Zherebtsov, I.Znakovskaya, A. L'Hullier, M. Yu. Ivanov, M. Nisoli.



Universidad Autónoma de Madrid

CENTRO

Líneas de Investigación

Nanotecnología, láseres ultracortos e inteligentes, problemas de catálisis.

Personal

Investigador: Fernando Martín

Datos de Contacto:

Dirección: C/ Francisco Tomás y Valiente, 7. Ciudad Universitaria de Cantoblanco
28049 Madrid

Teléfono: 91 4794019

e-mail: fernando.martin@uam.es

Web: www.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/fernando/.es