

Rayos X de colores para estudiar reacciones químicas en tiempo real

Investigadores del Laboratorio Nacional Argonne y otros centros de EE UU, coordinados por un científico español, han utilizado por primera vez dos pulsos de rayos X, con 'colores' o longitudes de onda diferentes, para analizar procesos moleculares ultrarápidos. Con un pulso han roto una molécula de difluoruro de xenón y con el otro han detectado los átomos de flúor sueltos en menos de 0,000000000000054 segundos. El avance se podría aplicar para estudiar otras moléculas de interés biológico o industrial mientras reaccionan a gran velocidad.

SINC

16/6/2016 11:00 CEST



El experimento se ha realizado de la Linac Coherent Light Source (LCLS), una fuente de luz del laboratorio SLAC que gestiona la Universidad de Stanford en California. / SLAC National Accelerator Laboratory

Las modernas técnicas ultrarápidas que se utilizan para seguir las reacciones químicas se basan en la emisión de dos pulsos de luz: uno láser o de rayos X que excita el sistema, y otro láser que se emite unos instantes más tarde para observar los resultados. Controlando el tiempo entre los dos

pulsos se puede fotografiar y grabar la película del proceso en tiempo real.

El problema es la dificultad de sincronizar los pulsos láser y X por una cuestión tecnológica. Los científicos no han logrado que el tiempo que transcurre entre ellos sea menor de un picosegundo (10^{-12} segundos). Este límite impide estudiar procesos fundamentales que suceden en la naturaleza a escala de femtosegundos (10^{-15} segundos), como los cambios estructurales o de transferencia de carga eléctrica que ocurren dentro de una molécula.

Los pulsos de rayos X pueden excitar regiones electrónicas muy cerca de los núcleos atómicos

Pero ahora un equipo de investigación del Laboratorio Nacional Argonne, liderado por el español Antonio Picón cerca de Chicago (EE UU), ha demostrado que se pueden superar esas barreras utilizando dos pulsos de rayos X con diferentes colores, es decir, con diferente energía o longitudes de onda.

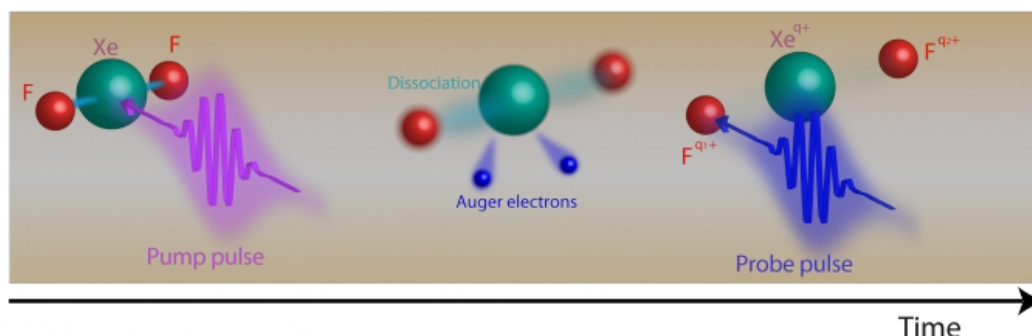
En el estudio, publicado en *Nature Communications*, también han colaborado científicos de la Universidad Estatal de Kansas y el Laboratorio Nacional de Aceleradores SLAC, gestionado por la Universidad de Stanford. De hecho, este experimento de espectroscopia de dos colores se ha realizado con el láser de electrones libres de rayos X (XFEL) de la Linac Coherent Light Source (LCLS), una fuente de luz de ese laboratorio SLAC.

“Los dos pulsos, de tan solo 10 femtosegundos cada uno, se pueden separar en un tiempo del orden de attosegundos (10^{-18} s)”, subraya Picón, quien destaca la ventaja que tienen los rayos X para excitar a los electrones situados muy cerca de los núcleos atómicos. En este caso, además, al ser de distintos colores, se pueden 'estimular' de forma selectiva regiones electrónicas diferentes con una precisión inferior al nanómetro.

Dos pulsos para ver como se rompe el difluro de xenón

En concreto, el equipo ha empleado un color de 683 electronvoltios (1,81

nanómetros) y otro de 690 eV (1,79 nm). El primero se ha usado para excitar un átomo de xenón (Xe) en la molécula difluoruro de xenón (XeF_2), induciendo su disociación, mientras que el segundo se absorbe en el átomo de flúor (F), permitiendo observar así la rápida separación de la molécula, que ocurre en menos de 54 femtosegundos.



Espectroscopia molecular con rayos X de dos colores: Un primer pulso de pocos femtosegundos es enviado a una molécula de difluoruro de xenón, lo que induce procesos de intercambio de energía y electrones. Unos cientos de attosegundos después, se envía un segundo pulso con una energía diferente que mide el estado del átomo de flúor, obteniendo información del proceso en tiempo real. / A. Picón et al. / Argonne National Laboratory

A diferencia de las técnicas ultrarápidas habituales, donde la dinámica es inducida por un pulso láser, en este caso ocurre por la absorción de un fotón de rayos X, que tienen mucha más energía que los fotones del espectro visible. “Este estudio demuestra que podemos seguir una disociación de menos de 54 fs después de la absorción de un fotón de rayos X, lo que abre las puertas a futuras investigaciones para estudiar procesos moleculares tan ultrarápidos como la transferencia de carga que se observa en el ADN o en moléculas fotosintéticas”, apunta Picón.

La técnica se podría aplicar en el futuro para estudiar estructuras biomoleculares y virus en 3D, lo que facilitará el diseño de medicamentos

Los investigadores confían en que la espectroscopia de rayos X de dos colores se pueda incorporar a los futuros dispositivos de este tipo de rayos ultraintensos y ultrarápidos que ya se están construyendo. Una de las

instalaciones será la versión renovada del XFEL en Stanford, el denominado LCLS-II, que operará en 2019. Otra será el XFEL europeo, localizado en Hamburgo (Alemania), cuya puesta en marcha está prevista para 2017.

Esta nueva generación de instrumentos producirá pulsos láser de rayos X con una velocidad de repetición sin precedentes, además de contar con un mayor control en los parámetros de los pulsos, como su energía y duración. A esto hay que sumar los avances en resolución de los llamados pulsos de rayos X blandos, como los que se desarrollan en el instituto ICFO de Barcelona.

Según Picón, todos estos avances “permitirán, por ejemplo, el estudio de estructuras biomoleculares y virus en 3D, lo que facilitará el diseño de nuevos medicamentos; así como ver el proceso de magnetización de materiales en tiempo real, o inspeccionar con enorme precisión las estructuras nanométricas importantes en futuras aplicaciones tecnológicas”.

Referencia bibliográfica:

Antonio Picón et al. “[Hetero-site-specific X-ray pump-probe spectroscopy](#) for femtosecond intramolecular dynamics”. *Nature Communications* 7: 11652, mayo de 2016.

Copyright: **Creative Commons**

TAGS

RAYOS X | LÁSER | LUZ | REACCIONES QUÍMICAS | ESPECTROSCOPÍA |

Creative Commons 4.0

You can copy, distribute and transform the contents of SINC. [Read the conditions of our license](#)

