

eman ta zabal zazu



Universidad  
del País Vasco

Euskal Herriko  
Unibertsitatea



13/05/2016

"In fraganti"

accesso

INTELLIGENCE TO SHINE

Fecha	Titular/Medio	Pág.	Docs.
03/05/16	Viewing a catalytic reaction in action / nanowerk.com	4	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / somosmuchos.es	6	1
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Bolsamania	7	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / SIGLO XXI	9	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / El Día	11	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Lainformacion.com	13	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / El Economista.es	15	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Informativos Telecinco	17	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / TribunaLeon.com	19	2
03/05/16	Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Yahoo! España	21	2
03/05/16	Un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas / Catalunya Vanguardista	23	3
03/05/16	Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Noodls	26	2
03/05/16	The intermediates in a chemical reaction photographed red-handed' / Noodls	28	2
03/05/16	'In fraganti' harrapatu dituzte erreakzio kimiko baten bitarteko substantziak / Universidad del País Vasco	30	2
03/05/16	Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / InterEmpresas Net	32	2
03/05/16	The intermediates in a chemical reaction photographed 'red-handed' / Alpha Galileo	34	2
03/05/16	Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Universidad del País Vasco	36	2
03/05/16	The intermediates in a chemical reaction photographed 'red-handed' / EurekAlert!	38	2
04/05/16	Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / NCYT	40	2
05/05/16	Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / quimica.es/noticias	42	3

Fecha	Titular/Medio	Pág.	Docs.
05/05/16	Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química / Portada de Bitacorras.com	45	1
05/05/16	The intermediates in a chemical reaction photographed 'red-handed' Researchers at the UPV/EHU-University of the Basque Country have for the first time succeeded in imaging all the steps in a complex organic reaction and have resolved the mechanisms that explain it / nanotech-now.com	46	2
06/05/16	Viewing a catalytic reaction in action / ChemEurope.com	48	2
09/05/16	Atomic force microscope reveals molecular ghosts / EurekAlert! - Breaking News	50	3
09/05/16	Atomic force microscope reveals chemical ghosts / noodls.com	53	4
09/05/16	Atomic force microscope reveals chemical ghosts / Berkeley News	57	3
10/05/16	Atomic force microscope reveals molecular ghosts / EurekAlert!	60	3
10/05/16	Atomic force microscope reveals molecular ghosts / PhysOrg.com	63	2
10/05/16	Atomic Force Microscope Reveals Chemical Ghosts / Laboratory Equipment	65	2
10/05/16	Atomic Force Microscope Reveals Chemical Ghosts / ECN	67	2
11/05/16	Atomic force microscope reveals chemical ghosts / globalnewsconnect.com	69	3
11/05/16	Atomic force microscope reveals molecular ghosts: Mapping molecules with atomic precision expands toolbox for designing new catalytic reactions / nanotech-now.com	72	3
11/05/16	Fotografiadas in fraganti las sustancias intermedias de una reacción química / Euskadi+innova	75	2
11/05/16	In fraganti harrapatu dituzte erreakzio kimiko baten bitarteko substantziak / Grupo Spri	77	2

## Viewing a catalytic reaction in action

**Martes, 3 de mayo de 2016**

(Nanowerk News) To be able to follow and directly visualize how the structure of molecules changes when they undergo complex chemical transformations has been a long-standing goal of chemistry. While reaction intermediates are particularly difficult to identify and characterize due to their short lifetimes, knowledge of the structure of these species can give valuable insights into reaction mechanisms and therefore impact fields beyond the chemical industry, such as materials science, nanotechnology, biology and medicine.

Now an international team of researchers led by Felix R. Fischer, Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and Lawrence Berkeley National Laboratory), and Angel Rubio (Director at the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter at CFEL in Hamburg and Distinguished Professor at the University of the Basque Country in San Sebastián) has imaged and resolved the bond configuration of reactants, intermediates and final products of a complex and technologically relevant organic surface reaction at the single-molecule level.

The findings are published in the journal *Nature Chemistry* ("Imaging single-molecule reaction intermediates stabilized by surface dissipation and entropy").

Identification of reactants, transient intermediates, and products in a bimolecular enediyne coupling and cyclization cascade on a silver surface by non-contact atomic force microscopy

Identification of reactants, transient intermediates, and products in a bimolecular enediyne coupling and cyclization cascade on a silver surface by non-contact atomic force microscopy. The corresponding chemical structures are depicted below the nc-AFM images. (Image: A. Riss/Technical University of Munich) (click on image to enlarge)

Chemical transformations at the interface between solid/liquid or solid/gaseous phases of matter lie at the heart of key industrial-scale manufacturing processes. The microscopic mechanism of this surface-catalyzed organic reaction is a grand challenge for modern heterogeneous catalysis and its application to industrial-scale chemical processes.

Competing pathways that lead to numerous intermediates and undesired side products often hamper investigation of the underlying reaction mechanisms that transform crude feedstock into complex value-added chemicals at the surface of a heterogeneous catalyst bed. The precise structural identification of transient reaction intermediates and products, however, is limited by their respective concentrations in the sample stream. In the present work, the chemical structures associated with different steps of a multistep reaction cascade of enediyne molecules on a silver surface were imaged using non-contact atomic force microscopy (nc-AFM) with special functionalized tips (using a carbon monoxide molecule to enhance resolution). Identification of the precise bond configuration of the intermediate species has allowed the determination of the intricate

sequence of chemical transformations along the pathway from reactants via intermediates to end products and thus allowed unraveling the microscopic mechanisms behind that intricate dynamical behavior.

It was striking to be able to directly measure and theoretically characterize the chemical structure of reaction intermediates in this complex system, said Felix Fischer, Professor for Chemistry at the University of Berkeley California and co-lead author of the study.

This is a huge step for chemical synthesis, added co-lead author Angel Rubio, Director at the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and Distinguished Professor for Physics at the University of the Basque Country. However, we wanted to go deeper and understand why the intermediates are stabilized on the surface this does not happen in solution.

A combination of extensive state-of-the-art numerical calculations with classic analytical models describing the kinetics of sequential chemical reactions has shown that it is not enough to consider the energy potential landscape (i.e. the energies of the species along the reaction pathway and the associated transformation barriers), but that energy dissipation to the substrate and changes in molecular entropy play a critical role for the stabilization of the intermediates. The surface, and in particular the interaction of molecular radicals with the surface, plays a key role for both, entropy and selective dissipation, highlighting fundamental differences of surface-supported reactions compared to gas-phase or solution chemistry.

Such detailed understanding constitutes a fundamental milestone in the analysis of chemical reactions that was achieved through the synergy between single-molecule visualization of chemical reactions and state-of-the-art high-performance computer modeling. By these means, many limitations of conventional ensemble averaging spectroscopic techniques are surpassed, and an unprecedented atomic-scale picture of the reaction mechanisms, driving forces and kinetics emerges.

Such new insight may open countless of hitherto unexplored venues for the future design and optimization of heterogeneous catalytic systems, for the development of novel synthetic tools applied to carbon-based nanotechnology, as well as for biochemical and materials science applications.

Source: Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter

If you liked this article, please give it a quick review on reddit or StumbleUpon. Thanks!

Read more: [Viewing a catalytic reaction in action](#)

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. **PULSE SOBRE EL ENLACE PARA VER EL ARTICULO COMPLETO:** Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

MADRID, 3 (EUROPA PRESS) Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

**ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS** Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de

las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.



## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

MADRID, 3 (EUROPA PRESS) Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

**ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS** Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de

las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Madrid, Europa Press Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

**ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS** Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de

las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

**ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS** Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente

inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

3/05/2016 - 12:01 Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. MADRID, 3 (EUROPA PRESS) Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo". ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie,

**Mar, 3 de may de 2016 12:09**

**Audiencia:** 499.010

**Ranking:** 7

**VPE:** 2.874

**Página:** 2

**Tipología:** online

y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.



## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

**ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS** Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega

un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. MADRID, 3 (EUROPA PRESS) Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo". ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente

inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

## Fotografían 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

MADRID, 3 (EUROPA PRESS) Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción, aquellas sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos, son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Los expertos han explicado que, conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. El nuevo logro, que ha sido publicado en 'Nature Chemistry', ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica --de una manera similar a la lectura en Braille--, ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, según ha explicado uno de los responsables del trabajo, Ángel Rubio. Además, ha apuntado que, a su vez, "ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

**ESTABILIZACIÓN DE INTERMEDIOS** Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales --el área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella--, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular, que mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de

**Audiencia:** 1.248.288

**Ranking:** 9

**VPE:** 5.043

**Página:** 2

**Tipología:** online

las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", según ha apuntado el investigador. Leer más En este sentido, ha indicado que "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales" y que se ha conseguido "una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según ha explicado Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

## Un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Secuencia de imágenes de las etapas de la reacción de moléculas de enediina sobre una superficie de plata (A. Riss / Technische Universität München) Fotografiadas in fraganti las sustancias intermedias de una reacción química Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. La revista Nature Chemistry publica esta investigación en su último número. . UPV/EHU Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. Angel Rubio, Dimas G. Oteyza y Alejandro Pérez (izq-dcha) UPV / EHU . Un prestigioso equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. La prestigiosa revista Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como dedo en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales explica Ángel Rubio, catedrático de la UPV/

EHU, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo. . Estabilización de intermedios Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular la entropía mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas, concreta. De hecho, con todo ello, se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales afirma, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética. Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas. . Información complementaria La investigación ha sido llevada a cabo por los grupos de investigación liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo). Cabe destacar que los cálculos fueron realizados por un investigador postdoctoral del grupo Nano-bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, el doctor Alejandro Pérez, y que los investigadores Ikerbasque Dimas G. Oteyza (DIPC) y Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) han jugado un papel importante en los experimentos que se hicieron en Berkeley cuando ellos estaban allí. Angel Rubio, Alejandro Pérez, Miguel Moreno Ugeda y Dimas G. Oteyza (izq-dcha) UPV / EHU . La actividad del grupo de investigación Nano-bio Spectroscopy Group, liderado por el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio miembro del Departamento de Ciencia de los Materiales, está enfocada a la investigación teórica y modelización de propiedades electrónicas y estructurales de la materia condensada, así como al desarrollo de nuevas herramientas teóricas y códigos computacionales para investigar la respuesta electrónica de los sólidos y nanoestructuras frente a campos electromagnéticos externos. . Referencia bibliográfica: Riss, A. Pérez Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio y F. R. Fischer. Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy. Nature Chemistry . 2016.



**Audiencia:** 1.048

**Ranking:** 4

**VPE:** 3

**Página:** 3

**Tipología:** online

DOI: 10.1038/nchem.2506 .

## Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Euskal Herriko Unibertsitatea (via noodls) / Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción - sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos- son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. Un prestigioso equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. La prestigiosa revista Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de etileno sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como 'dedo' en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias 'ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales -explica Ángel Rubio, catedrático de la UPV/EHU-, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo'. Estabilización de intermedios Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales -área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella-, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular -la entropía mide el grado de organización de un sistema-. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la

entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, 'constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas', concreta. De hecho, con todo ello, 'se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales -afirma-, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética'. Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

**Información complementaria** La investigación ha sido llevada a cabo por los grupos de investigación liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo). Cabe destacar que los cálculos fueron realizados por un investigador postdoctoral del grupo Nano-bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, el doctor Alejandro Pérez, y que los investigadores Ikerbasque Dimas G. Oteyza (DIPC) y Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) han jugado un papel importante en los experimentos que se hicieron en Berkeley cuando ellos estaban allí. La actividad del grupo de investigación Nano-bio Spectroscopy Group, liderado por el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio -miembro del Departamento de Ciencia de los Materiales-, está enfocada a la investigación teórica y modelización de propiedades electrónicas y estructurales de la materia condensada, así como al desarrollo de nuevas herramientas teóricas y códigos computacionales para investigar la respuesta electrónica de los sólidos y nanoestructuras frente a campos electromagnéticos externos.

## The intermediates in a chemical reaction photographed red-handed'

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Euskal Herriko Unibertsitatea (via noodles) / One of the long-standing goals being pursued by chemists has been to succeed in following and directly visualising how the structures of molecules change when they undergo complex chemical transformations. Reaction intermediates, which are highly unstable substances that form in different steps in a reaction before the products are obtained, are particularly difficult to identify and characterise owing to their short lifetimes. Getting to know the structure of these intermediate species may be very helpful in understanding the reaction mechanisms and, what is more, could have a great impact on the chemical industry, materials science, nanotechnology, biology and medicine. A leading international team of reers led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and the Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU-University of the Basque Country and leader of the UPV/EHU's Nano-Bio Spectroscopy Re Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg) has imaged and resolved the bond configuration of the reactants, the intermediates and final products of a complex, organic reaction at the single-molecule level. The prestigious journal Nature Chemistry has published this re in its latest issue. The team has obtained the images of the chemical structures associated with different steps in the reaction cascade involving multiple steps of enediyne molecules on a silver surface, using non-contact atomic force microscopy (nc-AFM) with a particularly sensitive tip: it uses a very fine needle that can detect the smallest bumps on an atomic scale (in a way not unlike reading in Braille) as it absorbs a carbon monoxide molecule that acts like a 'finger' on the text to increase its resolution. The precise identification of the bond configuration of the intermediate species 'has made it possible to determine the intricate sequence of chemical transformations along the reaction mechanism from reactants via intermediates to end products,' explained Ángel Rubio, the UPV/EHU professor, 'and at the same time unravel the microscopic mechanisms behind that intricate dynamical behaviour'. Stabilizing the intermediates By combining the latest advances in numerical calculus and the classical analytical models that describe the kinetics of sequential chemical reactions, an area that explores the speed of the reactions and the molecular events taking place in it has been proven. So to explain the stabilization of the intermediates, it is not enough just to consider their potential energy, it is essential to bear in mind the energy dissipation and the changes in molecular entropy, which measures how far a system is organised. The surface, and in particular the interaction of the extremely unstable intermediates with the surface, play a key role for both the entropy and the dissipation of energy, which highlights a fundamental difference between the surface-supported reactions and gas-phase or solution chemistry. Such detailed understanding achieved though the synergy between the imaging of the chemical reactions of a molecule and the latest advances in computer modelling 'constitutes a fundamental milestone in the analysis of chemical reactions,' he specified. In fact, as

he went on to highlight, with all this 'many of the limitations in conventional spectroscopic techniques have been surpassed and an unprecedented image has been obtained on an atomic scale of the reaction mechanisms, driving forces and kinetics'. According to Rubio, all this new knowledge may open up countless hitherto unexplored fields: future designs and optimizations of heterogeneous catalytic systems, development of novel synthetic tools applied to carbon-based nanotechnology, as well as biochemical and materials science applications. Additional information The re was carried out by the re groups led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU, leader of the UPV/EHU's Nano-Bio Spectroscopy Re Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg). It should be pointed out that the calculations were made by Dr Alejandro Pérez, the post-doctoral reer in the UPV/EHU's Nano-bio Spectroscopy Re Group, and that the Ikerbasque Re Professors Dimas G. Oteyza (DIPC) and Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) played a significant role in the experiments conducted at Berkeley when he was there. The activity of the Nano-bio Spectroscopy Re Group, led by the UPV/EHU professor Ángel Rubio and which is attached to the Department of Materials Sciences, focusses on the theoretical re and modelling of electronic and structural properties of condensed matter as well as the development of new theoretical tools and computer codes to explore the electronic response of solids and nanostructures when handling external electromagnetic fields.

## 'In fraganti' harrapatu dituzte erreazio kimiko baten bitarteko substantziak

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Luzaroan, kimikarien helburuetako bat izan da eraldaketa kimiko konplexuak gertatzean molekulen egiturak nola aldatzen diren zuzenean ikustea eta haien segimendua egin ahal izatea. Oso zaila da erreazio-bitartekoak erreazio batean, produktuak lortu baino lehen, etapa guztietan sortzen diren substantzia oso ezegonkorak identifikatzea eta karakterizatzea, oso bizitza laburra baitute. Bitarteko espezie horien egitura ezagutzea oso lagungarri izan daiteke erreazio-mekanismoak ulertzeko, eta horrek, gainera, eragin handia izan dezake industria kimikoan, materialen zientzian, nanoteknologian, biologian eta medikuntzan. Felix R. Fischer eta Michael F. Crommie (Kalifornia-Berkeleyko Unibertsitatea eta Lawrence Berkeley National Laboratory) eta Ángel Rubio (UPV/EHUko katedraduna, UPV/EHUko Nano-Bio Spectroscopy Group ikerketa-taldearen burua eta Hanburgoko Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter institutuko zuzendaria) buru dituzten nazioarteko ikertzailez osatutako talde batek erreazio organiko konplexu baten erreaktiboen, bitartekoen eta produktuen irudiak lortu ditu eta haien loturen konfigurazioa ebatzi du, molekula bakar baten mailan. Nature Chemistry aldizkari entzutetsuak argitaratu du ikerketa hau bere azken zenbakian. Eneidiina molekulek zilar-geruza baten gainean eragiten duten erreazio konplexuaren etapa guztietako egitura kimikoen irudiak lortu ditu lantaldeak, eta, horretarako, kontakturik gabeko indar atomikoko mikroskopio bat erabili dute (nc-AFM, ingelesezko izenarengatik), zunda bereziki sentikor batekin: eskala atomikoko irtengune txikiak detekta ditzakeen orratz oso fina erabiltzen du (Braille idatzitako testuak irakurtzen diren bezala); orratzaren puntan, karbono monoxido molekula bat adsorbatzen da, zeinak "hatz" gisa jokatzeko baitu irakurketan, bereizmena handitzeko. Bitarteko espezieen loturen konfigurazioaren identifikazio zehatzari esker, "erreazio-mekanismo osoan gertatzen diren aldaketa kimikoen sekuentzia konplexua argitu ahal izan da, erreaktiboetatik hasi, bitartekoetatik pasatu eta azken produktuekin amaituz azaldu du Ángel Rubio UPV/EHUko katedradunak, eta, aldi berean, aukera eman du halako portaera dinamiko konplexuan gertatzen diren mekanismo mikroskopikoak ebazteko". Bitartekoak egonkortzea Erreazio kimiko sekuntzialen zinetika erreazioen azkartasuna eta erreazioan izaten diren gertakizun molekularrak aztertzen dituen arloa deskribatzen duten eredu analitiko klasikoan eta zenbakizko kalkuluaren azken aurrerapenen arteko konbinazioari esker, frogatu dute bitarteko substantziak nola egonkortu diren azaltzeko ez dela nahikoa haien energia potentziala aintzat hartzea, baizik eta funtsezkoa dela kontuan hartzea energia-disipazioa eta entropia molekularren aldaketak entropiak sistema baten antolaketa-maila neurtzen du. Gainazalak eta, bereziki, erabat ezegonkorak diren bitarteko substantziek gainazalarekin dituzten interakzioek oso funtzio garrantzitsua dute bai entropian bai energia-disipazioan, eta, hain zuzen ere, horrek alde handia eragiten du gainazal batean gertatzen diren erreazioen eta gas-fasean edo disoluzioan gertatzen diren erreazioen artean. Molekula baten erreazio kimikoak bistaratzearen eta ordenagailu bidezko modelizazioan gertatzen diren azken aurrerapenen sinergiari

esker lortu da hain xehe ulertzea mekanismoa, eta, hori guztia "giltzarri da erreakzio kimikoen analisisian", zehaztu du ikertzaileak. Izan ere, horrekin guztiarekin, "teknika espektroskopiko konbentzionalen mugetako asko gainditu dira adierazi du, eta erreakzio-mekanismoak, indar eragileak eta zinetika ordura arte ez bezala eskala atomikoan irudikatzea lortu da". Rubiok azaltzen duenez, jakintza honek guztiak ezin konta ahala arlo berri zabal ditzake, orain arte sekula aztertu gabeak: sistema katalitiko heterogeneoen etorkizuneko diseinuak eta optimizazioak, karbonoaren nanoteknologiari aplikatutako sintesi-tresna berriak garatzea, bai eta materialen zientziako eta biokimikako aplikazioak ere. Informazio osagarria Ikerketa zenbait ikerketa-talderen lankidetzaz gauzatu da: Felix R. Fischer-en eta Michael F. Crommie-ren (Kalifornia-Berkeleyko Unibertsitatea eta Lawrence Berkeley National Laboratory) eta Ángel Rubioren taldeek (UPV/EHUko katedraduna, UPV/EHUko Nano-Bio Spectroscopy Group ikerketa-taldearen burua eta Hanburgoko Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter institutuko zuzendaria). Aipatzekoa da kalkuluak UPV/EHUko Nano-Bio Spectroscopy Group taldeko doktoretza osteko ikertzaile batek, Alejandro Pérez doktoreak, egin dituela, eta Dimas G. Oteyza (DIPC) eta Miguel Moreno Ugeda (Nanogune) Ikerbasque ikertzaileek oso paper garrantzitsua izan dutela Berkeley-n zegoen bitartean egin zituzten esperimientuetan. Ángel Rubio UPV/EHUko katedradunak Materialen Zientzia Saila unibertsitatean zuzentzen duen Nano-Bio Spectroscopy Group ikerketa-taldearen jarduerak ardatz hauek ditu: ikerketa teorikoa eta materia kondentsatuaren propietate elektronikoen eta egitura-propietateen modelizazioa; tresna teoriko eta kode konputazional berriak garatzea, solidoek eta nanoegiturek kanpoko eremu elektromagnetikoen aurrean duten erantzun elektronikoa ikertzeko.

## Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Investigadores de la UPV/EHU captan por primera vez la imagen de todas las etapas de una compleja reacción orgánica y resuelven los mecanismos que la explican. Redacción Interempresas 03/05/2016. Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. La revista Nature Chemistry publica esta investigación en su último número. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. Un prestigioso equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. La prestigiosa revista Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como dedo en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales explica Ángel Rubio, catedrático de la UPV/EHU, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo. Estabilización de intermedios. Mediante la combinación de los últimos avances



en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular la entropía mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución.

Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas, concreta. De hecho, con todo ello, se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales afirma, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética. Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

**Información complementaria** La investigación ha sido llevada a cabo por los grupos de investigación liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo). Cabe destacar que los cálculos fueron realizados por un investigador postdoctoral del grupo Nano-bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, el doctor Alejandro Pérez, y que los investigadores Ikerbasque Dimas G. Oteyza (DIPC) y Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) han jugado un papel importante en los experimentos que se hicieron en Berkeley cuando ellos estaban allí. La actividad del grupo de investigación Nano-bio Spectroscopy Group, liderado por el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio miembro del Departamento de Ciencia de los Materiales, está enfocada a la investigación teórica y modelización de propiedades electrónicas y estructurales de la materia condensada, así como al desarrollo de nuevas herramientas teóricas y códigos computacionales para investigar la respuesta electrónica de los sólidos y nanoestructuras frente a campos electromagnéticos externos.

**Referencia bibliográfica** A. Riss, A. Pérez Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio y F. R. Fischer. Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy. Nature Chemistry. 2016. DOI: 10.1038/nchem.25

## The intermediates in a chemical reaction photographed 'red-handed'

**Martes, 3 de mayo de 2016**

University of the Basque Country Researchers at the UPV/EHU-University of the Basque Country have for the first time succeeded in imaging all the steps in a complex organic reaction and have resolved the mechanisms that explain it. A distinguished international team of researchers, including the UPV/EHUs Nano-Bio Spectroscopy Research Group, has for the first time imaged and identified the bond configuration of the intermediates in a complex sequence of chemical transformations of enediyne molecules on a silver surface and has resolved the microscopic mechanisms that account for their behaviour. This piece of research has been published in the latest issue of the journal Nature Chemistry. One of the long-standing goals being pursued by chemists has been to succeed in following and directly visualising how the structures of molecules change when they undergo complex chemical transformations. Reaction intermediates, which are highly unstable substances that form in different steps in a reaction before the products are obtained, are particularly difficult to identify and characterise owing to their short lifetimes. Getting to know the structure of these intermediate species may be very helpful in understanding the reaction mechanisms and, what is more, could have a great impact on the chemical industry, materials science, nanotechnology, biology and medicine. A leading international team of researchers led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and the Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU-University of the Basque Country and leader of the UPV/EHUs Nano-Bio Spectroscopy Research Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg) has imaged and resolved the bond configuration of the reactants, the intermediates and final products of a complex, organic reaction at the single-molecule level. The prestigious journal Nature Chemistry has published this research in its latest issue. The team has obtained the images of the chemical structures associated with different steps in the reaction cascade involving multiple steps of enediyne molecules on a silver surface, using non-contact atomic force microscopy (nc-AFM) with a particularly sensitive tip: it uses a very fine needle that can detect the smallest bumps on an atomic scale (in a way not unlike reading in Braille) as it absorbs a carbon monoxide molecule that acts like a finger on the text to increase its resolution. The precise identification of the bond configuration of the intermediate species has made it possible to determine the intricate sequence of chemical transformations along the reaction mechanism from reactants via intermediates to end products, explained Ángel Rubio, the UPV/EHU professor, and at the same time unravel the microscopic mechanisms behind that intricate dynamical behaviour. By combining the latest advances in numerical calculus and the classical analytical models that describe the kinetics of sequential chemical reactions, an area that explores the speed of the reactions and the molecular events taking place in it has been proven. So to explain the stabilization of the intermediates, it is not enough just to consider their potential energy, it is essential to bear

in mind the energy dissipation and the changes in molecular entropy, which measures how far a system is organised. The surface, and in particular the interaction of the extremely unstable intermediates with the surface, play a key role for both the entropy and the dissipation of energy, which highlights a fundamental difference between the surface-supported reactions and gas-phase or solution chemistry. Such detailed understanding achieved through the synergy between the imaging of the chemical reactions of a molecule and the latest advances in computer modelling constitutes a fundamental milestone in the analysis of chemical reactions, he specified. In fact, as he went on to highlight, with all this many of the limitations in conventional spectroscopic techniques have been surpassed and an unprecedented image has been obtained on an atomic scale of the reaction mechanisms, driving forces and kinetics. According to Rubio, all this new knowledge may open up countless hitherto unexplored fields: future designs and optimizations of heterogeneous catalytic systems, development of novel synthetic tools applied to carbon-based nanotechnology, as well as biochemical and materials science applications. Full bibliographic information A. Riss, A. Pérez-Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio & F. R. Fischer. Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy. Nature Chemistry. 2016. DOI: 10.1038/nchem.25

## Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Martes, 3 de mayo de 2016**

Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. Un prestigioso equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. La prestigiosa revista Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de etileno sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como "dedo" en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales explica Ángel Rubio, catedrático de la UPV/EHU, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo". Estabilización de intermedios Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular la entropía mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía,

que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", concreta. De hecho, con todo ello, "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales afirma, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas. Información complementaria La investigación ha sido llevada a cabo por los grupos de investigación liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo). Cabe destacar que los cálculos fueron realizados por un investigador postdoctoral del grupo Nano-bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, el doctor Alejandro Pérez, y que los investigadores Ikerbasque Dimas G. Oteyza (DIPC) y Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) han jugado un papel importante en los experimentos que se hicieron en Berkeley cuando ellos estaban allí. La actividad del grupo de investigación Nano-bio Spectroscopy Group, liderado por el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio miembro del Departamento de Ciencia de los Materiales, está enfocada a la investigación teórica y modelización de propiedades electrónicas y estructurales de la materia condensada, así como al desarrollo de nuevas herramientas teóricas y códigos computacionales para investigar la respuesta electrónica de los sólidos y nanoestructuras frente a campos electromagnéticos externos. Fotografía: de izquierda a derecha, Ángel Rubio, Alejandro Pérez, Miguel Moreno y Dimas G. Oteyza (Gorka Estrada. UPV/EHU)

## The intermediates in a chemical reaction photographed 'red-handed'

**Martes, 3 de mayo de 2016**

EurekaAlert! provides embargoed and breaking science news you can't afford to miss. EurekaAlert! offers a one-stop science news distribution service you can trust. EurekaAlert! is a service of the American Association for the Advancement of Science. Researchers at the UPV/EHU-University of the Basque Country have for the first time succeeded in imaging all the steps in a complex organic reaction and have resolved the mechanisms that explain it University of the Basque Country IMAGE: Sequence of images of the steps in the reaction of enediyne molecules on a silver surface. view more Credit: A. Riss / Technische Universität München One of the long-standing goals being pursued by chemists has been to succeed in following and directly visualising how the structures of molecules change when they undergo complex chemical transformations. Reaction intermediates, which are highly unstable substances that form in different steps in a reaction before the products are obtained, are particularly difficult to identify and characterise owing to their short lifetimes. Getting to know the structure of these intermediate species may be very helpful in understanding the reaction mechanisms and, what is more, could have a great impact on the chemical industry, materials science, nanotechnology, biology and medicine. A leading international team of researchers led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and the Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU-University of the Basque Country and leader of the UPV/EHU's Nano-Bio Spectroscopy Research Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg) has imaged and resolved the bond configuration of the reactants, the intermediates and final products of a complex, organic reaction at the single-molecule level. The prestigious journal Nature Chemistry has published this research in its latest issue. The team has obtained the images of the chemical structures associated with different steps in the reaction cascade involving multiple steps of enediyne molecules on a silver surface, using non-contact atomic force microscopy (nc-AFM) with a particularly sensitive tip: it uses a very fine needle that can detect the smallest bumps on an atomic scale (in a way not unlike reading in Braille) as it absorbs a carbon monoxide molecule that acts like a "finger" on the text to increase its resolution. The precise identification of the bond configuration of the intermediate species "has made it possible to determine the intricate sequence of chemical transformations along the reaction mechanism from reactants via intermediates to end products," explained Ángel Rubio, the UPV/EHU professor, "and at the same time unravel the microscopic mechanisms behind that intricate dynamical behaviour". Stabilizing the intermediates By combining the latest advances in numerical calculus and the classical analytical models that describe the kinetics of sequential chemical reactions, an area that explores the speed of the reactions and the molecular events taking place in it has been proven. So to explain the stabilization of the intermediates, it is not enough just to consider their potential energy, it is essential to bear in mind the energy dissipation and the changes in

molecular entropy, which measures how far a system is organised. The surface, and in particular the interaction of the extremely unstable intermediates with the surface, play a key role for both the entropy and the dissipation of energy, which highlights a fundamental difference between the surface-supported reactions and gas-phase or solution chemistry. Such detailed understanding achieved through the synergy between the imaging of the chemical reactions of a molecule and the latest advances in computer modelling "constitutes a fundamental milestone in the analysis of chemical reactions," he specified. In fact, as he went on to highlight, with all this "many of the limitations in conventional spectroscopic techniques have been surpassed and an unprecedented image has been obtained on an atomic scale of the reaction mechanisms, driving forces and kinetics". According to Rubio, all this new knowledge may open up countless hitherto unexplored fields: future designs and optimizations of heterogeneous catalytic systems, development of novel synthetic tools applied to carbon-based nanotechnology, as well as biochemical and materials science applications. Additional information The research was carried out by the research groups led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU, leader of the UPV/EHU's Nano-Bio Spectroscopy Research Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg). It should be pointed out that the calculations were made by Dr Alejandro Pérez, the post-doctoral researcher in the UPV/EHU's Nano-bio Spectroscopy Research Group, and that the Ikerbasque Research Professors Dimas G. Oteyza (DIPC) and Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) played a significant role in the experiments conducted at Berkeley when he was there. The activity of the Nano-bio Spectroscopy Research Group, led by the UPV/EHU professor Ángel Rubio and which is attached to the Department of Materials Sciences, focusses on the theoretical research and modelling of electronic and structural properties of condensed matter as well as the development of new theoretical tools and computer codes to explore the electronic response of solids and nanostructures when handling external electromagnetic fields. Bibliographical reference A. Riss, A. Pérez-Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio & F. R. Fischer. "Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy". Nature Chemistry. 2016. DOI: 10.1038/nchem.2506 Disclaimer: AAAS and EurekaAlert! are not responsible for the accuracy of news releases posted to EurekaAlert! by contributing institutions or for the use of any information through the EurekaAlert system. Media Contact Matxalen Sotillo [komunikazioa@ehu.eus](mailto:komunikazioa@ehu.eus) 34-688-673-770 @upvehu University of the Basque Country

## Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Miércoles, 4 de mayo de 2016**

Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, en España, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de transformaciones químicas de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, y ha resuelto los mecanismos microscópicos que explican su comportamiento. La revista Nature Chemistry publica esta investigación en su último número. Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. Un prestigioso equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. La prestigiosa revista Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como "dedo" en la lectura, para aumentar su resolución. Secuencia de imágenes de las etapas de la reacción de moléculas de enediina sobre una superficie de plata. (Foto: A. Riss / Technische Universität München) La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales explica Ángel Rubio, catedrático de la UPV/EHU, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo". Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos



clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular la entropía mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", concreta. De hecho, con todo ello, "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales afirma, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas. La investigación ha sido llevada a cabo por los grupos de investigación liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo). Cabe destacar que los cálculos fueron realizados por un investigador postdoctoral del grupo Nano-bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, el doctor Alejandro Pérez, y que los investigadores Ikerbasque Dimas G. Oteyza (DIPC) y Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) han jugado un papel importante en los experimentos que se hicieron en Berkeley cuando ellos estaban allí. La actividad del grupo de investigación Nano-bio Spectroscopy Group, liderado por el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio miembro del Departamento de Ciencia de los Materiales, está enfocada a la investigación teórica y modelización de propiedades electrónicas y estructurales de la materia condensada, así como al desarrollo de nuevas herramientas teóricas y códigos computacionales para investigar la respuesta electrónica de los sólidos y nanoestructuras frente a campos electromagnéticos externos. (Fuente: UPV/EHU) Copyright © 1996-2015 Amazings® / NCYT® | (Noticiasdelaciencia.com / Amazings.com). Todos los derechos reservados. Depósito Legal B-47398-2009, ISSN 2013-6714 - Amazings y NCYT son marcas registradas. Noticiasdelaciencia.com y Amazings.com son las webs oficiales de Amazings. Todos los textos y gráficos son propiedad de sus autores. Prohibida la reproducción total o parcial por cualquier medio sin consentimiento previo por escrito. Excepto cuando se indique lo contrario, la traducción, la adaptación y la elaboración de texto adicional de este artículo han sido realizadas por el equipo de Amazings® / NCYT®.

## Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

Jueves, 5 de mayo de 2016

Investigadores de la UPV/EHU captan por primera vez la imagen de todas las etapas de una compleja reacción orgánica y resuelven los mecanismos que la explican

05.05.2016

reacción de moléculas de enediina

full-screen

A. Riss / Technische Universität München

Secuencia de imágenes de las etapas de la reacción de moléculas de enediina sobre una superficie de plata.

Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción - sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos - son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina.

Un equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número.

El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente

sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como "dedo" en la lectura, para aumentar su resolución.

La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias "ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales - explica Ángel Rubio, catedrático de la UPV/EHU -, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo".

#### Estabilización de intermedios

Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales - área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella -, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular - la entropía mide el grado de organización de un sistema -. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía, que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución.

Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, "constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas", concreta. De hecho, con todo ello, "se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales - afirma -, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética". Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas.

#### Publicación original:

A. Riss, A. Pérez Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio y F. R. Fischer. "Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy". Nature Chemistry. 2016.

**Audiencia:** 3.980

**Ranking:** 4

**VPE:** 14

**Página:** 3

**Tipología:** online

### Fotografiadas 'in fraganti' las sustancias intermedias de una reacción química

**Jueves, 5 de mayo de 2016**

[ [noticiasdelaciencia.com](http://noticiasdelaciencia.com) ] Un prestigioso equipo internacional de investigadores, entre los que se encuentra el grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, en España, ha fotografiado e identificado por primera vez la configuración de los enlaces de las especies intermedias de una compleja secuencia de... Etiquetas: [quimica](#) 141 puntos - [Ver comentarios](#) [Ir a anotación original](#)

## The intermediates in a chemical reaction photographed 'red-handed' Researchers at the UPV/EHU-University of the Basque Country have for the first time succeeded in imaging all the steps in a complex organic reaction and

**Jueves, 5 de mayo de 2016**

A leading international team of researchers led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and the Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU-University of the Basque Country and leader of the UPV/EHU's Nano-Bio Spectroscopy Research Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg) has imaged and resolved the bond configuration of the reactants, the intermediates and final products of a complex, organic reaction at the single-molecule level. The prestigious journal Nature Chemistry has published this research in its latest issue.

The team has obtained the images of the chemical structures associated with different steps in the reaction cascade involving multiple steps of enediyne molecules on a silver surface, using non-contact atomic force microscopy (nc-AFM) with a particularly sensitive tip: it uses a very fine needle that can detect the smallest bumps on an atomic scale (in a way not unlike reading in Braille) as it absorbs a carbon monoxide molecule that acts like a "finger" on the text to increase its resolution.

The precise identification of the bond configuration of the intermediate species "has made it possible to determine the intricate sequence of chemical transformations along the reaction mechanism from reactants via intermediates to end products," explained Ángel Rubio, the UPV/EHU professor, "and at the same time unravel the microscopic mechanisms behind that intricate dynamical behaviour".

### Stabilizing the intermediates

By combining the latest advances in numerical calculus and the classical analytical models that describe the kinetics of sequential chemical reactions, an area that explores the speed of the reactions and the molecular events taking place in it has been proven. So to explain the stabilization of the intermediates, it is not enough just to consider their potential energy, it is essential to bear in mind the energy dissipation and the changes in molecular entropy, which measures how far a system is organised. The surface, and in particular the interaction of the extremely unstable intermediates with the surface, play a key role for both the entropy and the dissipation of energy, which highlights a fundamental difference between the surface-supported reactions and gas-phase or solution chemistry.

Such detailed understanding achieved through the synergy between the imaging of the chemical reactions of a molecule and the latest advances in computer modelling "constitutes a fundamental milestone in the analysis of chemical reactions," he specified. In fact, as he went on to highlight, with all this "many of the limitations in conventional spectroscopic techniques have been surpassed and an unprecedented image has been obtained on an atomic scale of the reaction mechanisms, driving forces and kinetics". According to Rubio, all this new knowledge may open up countless hitherto unexplored fields: future designs and optimizations of heterogeneous catalytic systems, development of novel synthetic tools applied to carbon-based nanotechnology, as well as biochemical and materials science applications.

###

#### Additional information

The research was carried out by the research groups led by Felix R. Fischer and Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and Lawrence Berkeley National Laboratory), and by Angel Rubio (Professor at the UPV/EHU, leader of the UPV/EHU's Nano-Bio Spectroscopy Research Group, and Director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg). It should be pointed out that the calculations were made by Dr Alejandro Pérez, the post-doctoral researcher in the UPV/EHU's Nano-bio Spectroscopy Research Group, and that the Ikerbasque Research Professors Dimas G. Oteyza (DIPC) and Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) played a significant role in the experiments conducted at Berkeley when he was there.

The activity of the Nano-bio Spectroscopy Research Group, led by the UPV/EHU professor Ángel Rubio and which is attached to the Department of Materials Sciences, focusses on the theoretical research and modelling of electronic and structural properties of condensed matter as well as the development of new theoretical tools and computer codes to explore the electronic response of solids and nanostructures when handling external electromagnetic fields.

#### Bibliographic reference

A. Riss, A. Pérez Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio y F. R. Fischer. "Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy". Nature Chemistry. 2016. DOI: 10.1038/nchem.2506.

## Viewing a catalytic reaction in action

**Viernes, 6 de mayo de 2016**

A. Riss/TU Munich, adapted from A. Riss et al., Nature Chemistry (2016), DOI: 10.1038/nchem.2506

Identification of the different transient intermediates in a stepwise bimolecular enediyne coupling and cyclization cascade on a silver surface by non-contact atomic force microscopy. To be able to follow and directly visualize how the structure of molecules changes when they undergo complex chemical transformations has been a long-standing goal of chemistry. While reaction intermediates are particularly difficult to identify and characterize due to their short lifetimes, knowledge of the structure of these species can give valuable insights into reaction mechanisms and therefore impact fields beyond the chemical industry, such as materials science, nanotechnology, biology and medicine. Now an international team of researchers led by Felix R. Fischer, Michael F. Crommie (University of California at Berkeley and Lawrence Berkeley National Laboratory), and Angel Rubio (Director at the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter at CFEL in Hamburg and Distinguished Professor at the University of the Basque Country in San Sebastián) has imaged and resolved the bond configuration of reactants, intermediates and final products of a complex and technologically relevant organic surface reaction at the single-molecule level. Chemical transformations at the interface between solid/liquid or solid/gaseous phases of matter lie at the heart of key industrial-scale manufacturing processes. The microscopic mechanism of this surface-catalyzed organic reaction is a grand challenge for modern heterogeneous catalysis and its application to industrial-scale chemical processes. Competing pathways that lead to numerous intermediates and undesired side products often hamper investigation of the underlying reaction mechanisms that transform crude feedstock into complex value-added chemicals at the surface of a heterogeneous catalyst bed. The precise structural identification of transient reaction intermediates and products, however, is limited by their respective concentrations in the sample stream. In the present work, the chemical structures associated with different steps of a multistep reaction cascade of enediyne molecules on a silver surface were imaged using non-contact atomic force microscopy (nc-AFM) with special functionalized tips (using a carbon monoxide molecule to enhance resolution). Identification of the precise bond configuration of the intermediate species has allowed the determination of the intricate sequence of chemical transformations along the pathway from reactants via intermediates to end products and thus allowed unraveling the microscopic mechanisms behind that intricate dynamical behavior. It was striking to be able to directly measure and theoretically characterize the chemical structure of reaction intermediates in this complex system, said Felix Fischer, Professor for Chemistry at the University of Berkeley California and co-lead author of the study. This is a huge step for chemical synthesis, added co-lead author Angel Rubio, Director at the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and Distinguished Professor for Physics at the University of the Basque Country. However, we wanted to go deeper and understand why the



intermediates are stabilized on the surface this does not happen in solution. A combination of extensive state-of-the-art numerical calculations with classic analytical models describing the kinetics of sequential chemical reactions has shown that it is not enough to consider the energy potential landscape (i.e. the energies of the species along the reaction pathway and the associated transformation barriers), but that energy dissipation to the substrate and changes in molecular entropy play a critical role for the stabilization of the intermediates. The surface, and in particular the interaction of molecular radicals with the surface, plays a key role for both, entropy and selective dissipation, highlighting fundamental differences of surface-supported reactions compared to gas-phase or solution chemistry. Such detailed understanding constitutes a fundamental milestone in the analysis of chemical reactions that was achieved through the synergy between single-molecule visualization of chemical reactions and state-of-the-art high-performance computer modeling. By these means, many limitations of conventional ensemble averaging spectroscopic techniques are surpassed, and an unprecedented atomic-scale picture of the reaction mechanisms, driving forces and kinetics emerges. Such new insight may open countless of hitherto unexplored venues for the future design and optimization of heterogeneous catalytic systems, for the development of novel synthetic tools applied to carbon-based nanotechnology, as well as for biochemical and materials science applications. Original publication: A. Riss, A. Pérez Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio, and F. R. Fischer; "Imaging single-molecule reaction intermediates stabilized by surface dissipation and entropy"; Nature Chemistry; 2

## Atomic force microscope reveals molecular ghosts

**Lunes, 9 de mayo de 2016**

IMAGE: An atomic force microscope was able to take a snapshot of the atoms before and after the reaction, but also found two supposedly short-lived intermediates (center) in this reaction of... [view more](#) Credit: UC Berkeley To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see.

Chemical reactions take place so rapidly - often within picoseconds, or a trillionth of a second - that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts - like a strobe flashing every thousandth of a picosecond - can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product.

Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo.

"Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short lived," said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. "Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on."

The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen.

Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine.

"The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface," he said. "If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on."

A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal *Nature Chemistry*.

Atomic force microscopy

Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional

structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred.

Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction.

During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories.

Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill - once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory.

Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed.

Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy - essentially the level of disorder or chaos in a system - hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst - a high entropy situation - to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation.

"Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction," he said. "It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire."

Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene.

"We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years," he said. "This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now."

### Other co-authors of the Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of the Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of the Donostia International Physics Center in San Sebastián, Spain. The work was funded by the Department of Energy, Office of Naval Research, European Research Council and Grupos Consolidados UPV/EHU del Gobierno Vasco.

## Atomic force microscope reveals chemical ghosts

**Lunes, 9 de mayo de 2016**

To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see.

Chemical reactions take place so rapidly - often within picoseconds, or a trillionth of a second - that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts - like a strobe flashing every thousandth of a picosecond - can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product.

A simulation showing how the vibrational energy of a molecule is shared with the surface of the catalyst it sits on, which affects how quickly the molecule reacts - in this case, two arms at left linking to form a ring. The individual atoms of the silver catalyst get brighter yellow as they heat up and vibrate more. The simulation covers about a picosecond, or a trillionth of a second. (Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter)

Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo.

'Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short lived,' said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. 'Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on.'

The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen.

Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine.

'The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface,' he said. 'If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on.'

A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal Nature Chemistry.

### Atomic force microscopy

Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred.

[Attachment]

An atomic force microscope was able to take a snapshot of the atoms before and after the reaction, but also found two supposedly short-lived intermediates (center) in this reaction of two enediyne molecules.

Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction.

During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories.

Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill - once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit

a rock on its downhill trajectory.

Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed.

Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy - essentially the level of disorder or chaos in a system - hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst - a high entropy situation - to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation.

[Attachment]

Supercomputer simulations show how the energy in a molecule is shared with the atoms of the catalyst (yellow balls), affecting how quickly the two enediyne molecules react.

'Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction,' he said. 'It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire.'

Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene.

'We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years,' he said. 'This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now.'

Other co-authors of the Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of the Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of the Donostia International Physics Center

**Audiencia:** 31.201

**Ranking:** 5

**VPE:** 168

**Página:** 4

**Tipología:** online

in San Sebastián, Spain.

The work was funded by the Department of Energy, Office of Naval Research, European Research Council and Grupos Consolidados UPV/EHU del Gobierno Vasco.

#### RELATED INFORMATION

- See more at: <http://www.noodles.com/view/54D16A5FCF256C12ECA582CC83F7EC0E02489A4D#sthash.gtoyWHbx.dpuf>



## Atomic force microscope reveals chemical ghosts

Lunes, 9 de mayo de 2016

To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see. Chemical reactions take place so rapidly—often within picoseconds, or a trillionth of a second—that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts—like a strobe flashing every thousandth of a picosecond—can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product. A simulation showing how the vibrational energy of a molecule is shared with the surface of the catalyst it sits on, which affects how quickly the molecule reacts—in this case, two arms at left linking to form a ring. The individual atoms of the silver catalyst get brighter yellow as they heat up and vibrate more. The simulation covers about a picosecond, or a trillionth of a second. (Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter) Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo. Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short-lived, said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on. The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen. Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine. The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface, he said. If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on. A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal *Nature Chemistry*. Atomic force microscopy Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred. An atomic force microscope

was able to take a snapshot of the atoms before and after the reaction, but also found two supposedly short-lived intermediates (center) in this reaction of two enediyne molecules. Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction. During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories. Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory. Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed. Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy essentially the level of disorder or chaos in a system hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst a high entropy situation to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation. Supercomputer simulations show how the energy in a molecule is shared with the atoms of the catalyst (yellow balls), affecting how quickly the two enediyne molecules react. Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction, he said. It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire. Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene. We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years, he said. This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now. Other co-authors of the Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian

**Audiencia:** 22.164

**Ranking:** 7

**VPE:** 88

**Página:** 3

**Tipología:** blogs

Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of the Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of the Donostia International Physics Center in San Sebastián, Spain. The work was funded by the Department of Energy, Office of Naval Research, European Research Council and Grupos Consolidados UPV/EHU del Gobierno Vasco. RELATED INFORMATION Imaging Single-Molecule Reaction Intermediates Stabilized by Surface Dissipation and Entropy (Nature Chemistry) Felix Fischers web site Michael Crommies web site Angel Rubios web site

## Atomic force microscope reveals molecular ghosts

**Martes, 10 de mayo de 2016**

EurekaAlert! provides embargoed and breaking science news you can't afford to miss. EurekaAlert! offers a one-stop science news distribution service you can trust. EurekaAlert! is a service of the American Association for the Advancement of Science. Mapping molecules with atomic precision expands toolbox for designing new catalytic reactions University of California - Berkeley **IMAGE:** An atomic force microscope was able to take a snapshot of the atoms before and after the reaction, but also found two supposedly short-lived intermediates (center) in this reaction of... [view more](#) Credit: UC Berkeley To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see. Chemical reactions take place so rapidly - often within picoseconds, or a trillionth of a second - that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts - like a strobe flashing every thousandth of a picosecond - can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product. Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo. "Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short lived," said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. "Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on." The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen. Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine. "The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface," he said. "If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on." A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal Nature Chemistry. **Atomic force microscopy** Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic

force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred. Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction. During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories. Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill - once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory. Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed. Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy - essentially the level of disorder or chaos in a system - hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst - a high entropy situation - to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation. "Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction," he said. "It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire." Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene. "We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years," he said. "This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now." Other co-authors of the Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of the Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of the

**Mar, 10 de may de 2016 15:00**

**Audiencia:** 144.574

**Ranking:** 6

**VPE:** 768

**Página:** 3

**Tipología:** online

Donostia International Physics Center in San Sebastián, Spain. The work was funded by the Department of Energy, Office of Naval Research, European Research Council and Grupos Consolidados UPV/EHU del Gobierno Vasco. Disclaimer: AAAS and EurekAlert! are not responsible for the accuracy of news releases posted to EurekAlert! by contributing institutions or for the use of any information through the EurekAlert system. Media Contact Robert Sanders [rlsanders@berkeley.edu](mailto:rlsanders@berkeley.edu) 510-643-6998 @UCBerkeleyNews University of California - Berkeley

## Atomic force microscope reveals molecular ghosts

**Martes, 10 de mayo de 2016**

To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see. Chemical reactions take place so rapidly - often within picoseconds, or a trillionth of a second - that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts - like a strobe flashing every thousandth of a picosecond - can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product. Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo. "Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short lived," said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. "Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on." The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen. Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine. "The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface," he said. "If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on." A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal Nature Chemistry. Atomic force microscopy Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred. Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction. During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not

only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories. Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill - once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory. Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed. Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy - essentially the level of disorder or chaos in a system - hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst - a high entropy situation - to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation. "Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction," he said. "It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire." Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene. "We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years," he said. "This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now." More information: A. Riss, A. Pérez Paz, S. Wickenburg, H.-Z. Tsai, D. G. de Oteyza, A. J. Bradley, M. M. Ugeda, P. Gorman, H. S. Jung, M. F. Crommie, A. Rubio, and F. R. Fischer, "Imaging single-molecule reaction intermediates stabilized by surface dissipation and entropy," *Nature Chemistry*, Advance Online Publication (May 2, 2016), DOI: 10.1038/nchem.2506 Provided by University of California - Berkeley " " May 10, 2016 <http://phys.org/news/2016-05-atomic-microscope-reveals-molecular-ghosts.htm> |



## Atomic Force Microscope Reveals Chemical Ghosts

**Martes, 10 de mayo de 2016**

To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see. Chemical reactions take place so rapidly—often within picoseconds, or a trillionth of a second—that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts—like a strobe flashing every thousandth of a picosecond—can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product. Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo. Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short-lived, said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on. The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen. Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine. The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface, he said. If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on. A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal *Nature Chemistry*. Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred. Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction. During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not only the

starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories. Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory. Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed. Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy essentially the level of disorder or chaos in a system hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst a high entropy situation to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation. Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction, he said. It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire. Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene. We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years, he said. This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now.

## Atomic Force Microscope Reveals Chemical Ghosts

**Martes, 10 de mayo de 2016**

To the surprise of chemists, a new technique for taking snapshots of molecules with atomic precision is turning up chemicals they shouldn't be able to see. Chemical reactions take place so rapidly—often within picoseconds, or a trillionth of a second—that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts—like a strobe flashing every thousandth of a picosecond—can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product. Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo. Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short-lived, said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on. The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen. Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine. The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface, he said. If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on. A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal *Nature Chemistry*. Atomic force microscopy Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred. Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction. During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw

not only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories. Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory. Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed. Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy essentially the level of disorder or chaos in a system hates to decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst a high entropy situation to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation. Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction, he said. It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire. Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene. We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years, he said. This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now. Other co-authors of the Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of the Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of the Donostia International Physics Center in San Sebastián, Spain. The work was funded by the Department of Energy, Office of Naval Research, European Research Council and Grupos Consolidados UPV/EHU del Gobierno Vasco.

## Atomic force microscope reveals chemical ghosts

**Miércoles, 11 de mayo de 2016**

To a warn of chemists, a new technique for holding snapshots of molecules with atomic pointing is branch adult chemicals they shouldn t be means to see.

Chemical reactions take place so fast mostly within picoseconds, or a trillionth of a second that chemists pattern middle stairs in a greeting to be too brief to observe. Only lasers banishment in femtosecond bursts like a strobe flashing any thousandth of a picosecond can constraint a passing molecular structures that reacting chemicals form on their approach to a final product.

Yet a group of chemists and physicists from a University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of dual molecules reacting on a aspect of a catalyst, and found middle structures durability for a 20 mins or so it takes to snap a photo.

Intuitively, we did not pattern to see these transitory intermediates, since they are so brief lived, pronounced Felix Fischer, an partner highbrow of chemistry during UC Berkeley. Based on a normal understanding, we would pattern to see a starting materials and really shortly after, usually a product. But we see these intermediates, so something else is going on.

The reason for these resounding molecules is now fleshing out sum of catalytic reactions that chemists have usually vaguely accepted until now, and providing new manners for chemical reactions that chemists can feat to make reactions go faster or some-more efficiently, or build molecules never before seen.

Fischer himself is usually commencement to build a toolbox that will assistance pattern or urge catalytic reactions, that are a workhorse of a world s chemical industry, obliged for producing all from fuel to a building blocks of plastics. These collection could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine.

The approach chemists consider about extrinsic catalysis appears to be an deficient pattern of what is indeed function on a surface, he said. If we can know how to take this apparatus box and use it in a pattern of new structures or a singularity of new materials, that opens a whole new margin of chemistry that so distant has been dim to us, since we did not know how to indeed daydream what is going on.

A paper describing their work seemed online this week in allege of announcement in a biography Nature Chemistry.

### Atomic force microscopy

Because chemical reactions start so rapidly, chemists can usually infer how chemicals change during a process, as holds between atoms mangle and reform, branches stagger or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley s Michael Crommie, highbrow of physics, teamed adult to request a atom-scale pointing of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, perplexing to endorse what chemists have always inferred.

An atomic force microscope was means to take a picture of a atoms before and after a reaction, though also found dual presumably ephemeral intermediates (center) in this greeting of dual enediyne molecules.

An atomic force microscope was means to take a picture of a atoms before and after a reaction, though also found dual presumably ephemeral intermediates (center) in this greeting of dual enediyne molecules.

Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a aspect and detects particular atoms around a little moving examine with a supportive CO monoxide proton during a tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a bullion or china aspect and feverishness them to make them conflict slowly, afterwards use a nc-AFM to take snapshots over a march of a reaction.

During their initial try to picture a greeting between dual molecules, they saw not usually a starting chemicals and finish product, though also dual middle chemical structures that should not have been there. If we consider of a greeting as a method of many middle chemical rearrangements, a easy constructional changes should occur fast while some-more difficult rearrangements would be slower, since there s a aloft appetite separator to creation those changes. But a intermediates he saw were ones that should have left a fastest, formed on stream theories.

Organic chemists like Fischer tend to consider of a chemical greeting as same to descending downhill once it starts, a possess appetite keeps it going until a final product appears. This judgment didn t explain his results, however, so he borrowed an thought from chemical engineers who work with catalysts. To them, some middle states are firm some-more closely to a catalytic aspect and remove appetite to it, negligence a reaction. It s as if a greeting strike a stone on a downhill trajectory.

Fischer s colleague, Angel Rubio, executive of a Max Planck Institute for a Structure and Dynamics of Matter

in Hamburg and a highbrow during a University of a Basque Country in Spain, done endless supercomputer calculations holding this aspect contracting into account, though still was not means to envision a intermediates indeed observed.

Together they finally strike on a thought of holding into comment a entropy changes during any step of a reaction, and matched observations exactly. Entropy radically a turn of commotion or disharmony in a complement hates to decrease, according to a third law of thermodynamics. So some transitions that seem vigorously easy get stranded since they go from a stretchable structure loosely firm to a matter a high entropy conditions to a some-more rigid, firmly firm and lower-entropy situation.

Supercomputer simulations uncover how a appetite in a proton is common with a atoms of a matter (yellow balls), inspiring how fast a dual enediyne molecules react.

Supercomputer simulations uncover how a appetite in a proton is common with a atoms of a matter (yellow balls), inspiring how fast a dual enediyne molecules react.

Taking entropy into comment could assistance we know a placement of products we get from a extrinsic catalysis reaction, he said. It could assistance we envision that intermediates have a prolonged lifetime on a surface, that ones could pierce around, adsorb or desorb from a surface, heading to a product placement that competence not be what we want. Then we could balance a greeting towards a product that we desire.

Fischer used his flourishing toolbox final year to make a proton that was likely some-more than half a century ago though unachievable regulating customary organic chemistry in solution. Instead, he built it on a aspect of a matter from custom-made molecules that would routinely not conflict in a right way, though that he guided to emanate an antiferromagnetic proton called peripentacene.

We used this toolbox of aspect chemistry and a manners we have schooled to make a proton that no one had been means to make in 60 years, he said. This is an instance of because it is critical to know what is function on these surfaces, and how we can use this bargain to entrance structures and reactivities that are not permitted with a customary collection we have right now.

Other co-authors of a Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of a Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of a Donostia International Physics Center in San Sebastián, Spain.

## Atomic force microscope reveals molecular ghosts: Mapping molecules with atomic precision expands toolbox for designing new catalytic reactions

**Miércoles, 11 de mayo de 2016**

Berkeley, CA | Posted on May 11th, 2016

Chemical reactions take place so rapidly - often within picoseconds, or a trillionth of a second - that chemists expect intermediate steps in the reaction to be too brief to observe. Only lasers firing in femtosecond bursts - like a strobe flashing every thousandth of a picosecond - can capture the fleeting molecular structures that reacting chemicals form on their way to a final product.

Yet a team of chemists and physicists from the University of California, Berkeley, and Lawrence Berkeley National Laboratory has taken snapshots of two molecules reacting on the surface of a catalyst, and found intermediate structures lasting for the 20 minutes or so it takes to snap a photo.

"Intuitively, we did not expect to see these transient intermediates, because they are so short lived," said Felix Fischer, an assistant professor of chemistry at UC Berkeley. "Based on our traditional understanding, you would expect to see the starting materials and very shortly after, only the product. But we see these intermediates, so something else is going on."

The explanation for these ghostly molecules is now fleshing out details of catalytic reactions that chemists have only vaguely understood until now, and providing new rules for chemical reactions that chemists can exploit to make reactions go faster or more efficiently, or build molecules never before seen.

Fischer himself is just beginning to build a toolbox that will help design or improve catalytic reactions, which are the workhorse of the world's chemical industry, responsible for producing everything from fuel to the building blocks of plastics. These tools could also impact fields such as materials science, nanotechnology, biology and medicine.

"The way chemists think about heterogeneous catalysis appears to be an incomplete picture of what is actually happening on the surface," he said. "If we can understand how to take this tool box and use it in the design of new structures or the synthesis of new materials, that opens a whole new field of chemistry that so far has been dark to us, because we did not know how to actually visualize what is going on."



A paper describing their work appeared online this week in advance of publication in the journal Nature Chemistry.

### Atomic force microscopy

Because chemical reactions occur so rapidly, chemists can only infer how chemicals change during the process, as bonds between atoms break and reform, branches rotate or join to form rings, and three-dimensional structures shift. Three years ago, Fischer and UC Berkeley's Michael Crommie, professor of physics, teamed up to apply the atom-scale precision of atomic force microscopy to take snapshots of molecules before and after a reaction, trying to confirm what chemists have always inferred.

Their non-contact atomic force microscope, or nc-AFM, hovers above a surface and detects individual atoms via a microscopic vibrating probe with a sensitive carbon monoxide molecule at its tip. Fischer, Crommie and their UC Berkeley colleagues place molecules on a gold or silver surface and heat them to make them react slowly, then use the nc-AFM to take snapshots over the course of the reaction.

During their first attempt to image a reaction between two molecules, they saw not only the starting chemicals and end product, but also two intermediate chemical structures that should not have been there. If you think of a reaction as a sequence of many intermediate chemical rearrangements, the easy structural changes should happen quickly while more complicated rearrangements would be slower, because there's a higher energy barrier to making those changes. But the intermediates he saw were ones that should have disappeared the fastest, based on current theories.

Organic chemists like Fischer tend to think of a chemical reaction as akin to falling downhill - once it starts, its own energy keeps it going until the final product appears. This concept didn't explain his results, however, so he borrowed an idea from chemical engineers who work with catalysts. To them, some intermediate states are bound more closely to the catalytic surface and lose energy to it, slowing the reaction. It's as if the reaction hit a rock on its downhill trajectory.

Fischer's colleague, Angel Rubio, director of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter in Hamburg and a professor at the University of the Basque Country in Spain, made extensive supercomputer calculations taking this surface binding into account, but still was not able to predict the intermediates actually observed.

Together they finally hit on the idea of taking into account the entropy changes at each step of the reaction, and matched observations exactly. Entropy - essentially the level of disorder or chaos in a system - hates to

decrease, according to the third law of thermodynamics. So some transitions that seem energetically easy get stuck because they go from a flexible structure loosely bound to the catalyst - a high entropy situation - to a more rigid, tightly bound and lower-entropy situation.

"Taking entropy into account could help you understand the distribution of products you get from a heterogeneous catalysis reaction," he said. "It could help you predict which intermediates have a long lifetime on the surface, which ones could move around, adsorb or desorb from the surface, leading to a product distribution that might not be what you want. Then you could tune the reaction towards the product that you desire."

Fischer used his growing toolbox last year to make a molecule that was predicted more than half a century ago but unachievable using standard organic chemistry in solution. Instead, he built it on the surface of a catalyst from custom-made molecules that would normally not react in the right way, but which he guided to create an antiferromagnetic molecule called peripentacene.

"We used this toolbox of surface chemistry and the rules we have learned to make a molecule that no one had been able to make in 60 years," he said. "This is an example of why it is important to understand what is happening on these surfaces, and how you can use this understanding to access structures and reactivities that are not accessible with the standard tools we have right now."

###

Other co-authors of the Nature Chemistry paper are Alexander Riss, Sebastian Wickenburg, Hsin-Zon Tsai, Aaron Bradley, Miguel Ugeda, Han Sae Jung and Patrick Gorman of UC Berkeley, Alejandro Pérez Paz of the Universidad del País Vasco in Spain and Dimas G. De Oteyza of the Donostia International Physics Center in San Sebastián, Spain.

The work was funded by the Department of Energy, Office of Naval Research, European Research Council and Grupos Consolidados UPV/EHU del Gobierno Vasco.

## Fotografiadas in fraganti las sustancias intermedias de una reacción química

**Miércoles, 11 de mayo de 2016**

Uno de los objetivos que durante muchísimo tiempo han perseguido los químicos ha sido ser capaces de poder seguir y visualizar directamente cómo cambian las estructuras de las moléculas cuando experimentan complejas transformaciones químicas. Los intermedios de reacción sustancias muy inestables que se forman en las diferentes etapas de una reacción, antes de obtener los productos son extremadamente difíciles de identificar y caracterizar, debido a su corta vida. Conocer la estructura de estas especies intermedias puede ser de gran ayuda para entender los mecanismos de la reacción, y eso, además, puede generar un gran impacto en la industria química, la ciencia de materiales, la nanotecnología, la biología y la medicina. Un prestigioso equipo internacional de investigadores liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie ( Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo) ha captado la imagen y ha resuelto la configuración de los enlaces de los reactivos, de los intermedios y de los productos finales de una compleja reacción orgánica, a nivel de una sola molécula. La prestigiosa revista Nature Chemistry ha publicado la investigación en su último número. El equipo ha conseguido las imágenes de las estructuras químicas asociadas a diferentes etapas de la reacción en cascada, de múltiples etapas, de moléculas de enediina sobre una superficie de plata, utilizando un microscopio de fuerza atómica sin contacto (nc-AFM, por sus siglas en inglés) con una sonda especialmente sensible: utiliza una aguja muy fina que puede detectar las más pequeñas protuberancias a escala atómica (de una manera similar a la lectura en Braille), ya que se adsorbe una molécula de monóxido de carbono que actúa como dedo en la lectura, para aumentar su resolución. La identificación precisa de la configuración de enlaces de las especies intermedias ha permitido determinar la compleja secuencia de transformaciones químicas a lo largo del mecanismo de reacción, partiendo de los reactivos, pasando por los intermedios y acabando en los productos finales, explica Ángel Rubio catedrático de la UPV/EHU, y, a su vez, ha permitido resolver los mecanismos microscópicos que suceden en este comportamiento dinámico tan complejo. Estabilización de intermedios Mediante la combinación de los últimos avances en cálculo numérico y los modelos analíticos clásicos que describen la cinética de reacciones químicas secuenciales área que estudia la rapidez de las reacciones y los eventos moleculares que suceden en ella, ha quedado probado que, para explicar la estabilización de las sustancias intermedias, no es suficiente considerar la energía potencial de las mismas, sino que es fundamental tener en cuenta la disipación de energía y los cambios de entropía molecular la entropía mide el grado de organización de un sistema. La superficie, y en particular la interacción de las sustancias intermedias extremadamente inestables con la superficie, juega un papel fundamental tanto en la entropía como en la disipación de energía,

**Audiencia:** 84**Ranking:** 3**VPE:** -**Página:** 2**Tipología:** online

que marca una gran diferencia entre las reacciones soportadas en una superficie y las reacciones en fase gaseosa o en disolución. Esta detallada comprensión, conseguida gracias a la sinergia entre la visualización de las reacciones químicas de una molécula y los últimos avances en modelización computacional, constituye un hito fundamental en el análisis de las reacciones químicas, concreta. De hecho, con todo ello, se han superado muchas de las limitaciones de las técnicas espectroscópicas convencionales afirma, y se ha conseguido una imagen a escala atómica, sin precedentes, de los mecanismos de reacción, las fuerzas impulsoras y la cinética. Según explica Rubio, todo este nuevo conocimiento puede abrir incontables nuevos campos, nunca explorados hasta el momento: futuros diseños y optimizaciones de sistemas catalíticos heterogéneos, desarrollo de nuevas herramientas de síntesis aplicadas a la nanotecnología del carbono, así como aplicaciones en ciencias de materiales y bioquímicas. Información complementaria La investigación ha sido llevada a cabo por los grupos de investigación liderados por Felix R. Fischer y Michael F. Crommie (Universidad de California en Berkeley y Lawrence Berkeley National Laboratory) y por Ángel Rubio (catedrático de la UPV/EHU, líder del grupo de investigación Nano-Bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU y director del Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter de Hamburgo). Cabe destacar que los cálculos fueron realizados por un investigador postdoctoral del grupo Nano-bio Spectroscopy Group de la UPV/EHU, el doctor Alejandro Pérez, y que los investigadores Ikerbasque Dimas G. Oteyza (DIPC) y Miguel Moreno Ugeda (CIC Nanogune) han jugado un papel importante en los experimentos que se hicieron en Berkeley cuando ellos estaban allí. La actividad del grupo de investigación Nano-bio Spectroscopy Group, liderado por el catedrático de la UPV/EHU Ángel Rubio miembro del Departamento de Ciencia de los Materiales, está enfocada a la investigación teórica y modelización de propiedades electrónicas y estructurales de la materia condensada, así como al desarrollo de nuevas herramientas teóricas y códigos computacionales para investigar la respuesta electrónica de los sólidos y nanoestructuras frente a campos electromagnéticos externos. The post appeared first on SPRI .

## In fraganti harrapatu dituzte erreakzio kimiko baten bitarteko substantziak

### Miércoles, 11 de mayo de 2016

Proiektuaren ikertzaileak.]. Luzaroan, kimikarien helburuetako bat izan da eraldaketa kimiko konplexuak gertatzean molekulen egiturak nola aldatzen diren zuzenean ikustea eta haien segimendua egin ahal izatea. Oso zaila da erreakzio-bitartekoak erreakzio batean, produktuak lortu baino lehen, etapa guztietan sortzen diren substantzia oso ezegonkorak identifikatzea eta karakterizatzea, oso bizitza laburra baitute. Bitarteko espezie horien egitura ezagutzea oso lagungarri izan daiteke erreakzio-mekanismoak ulertzeko, eta horrek, gainera, eragin handia izan dezake industria kimikoan, materialen zientzian, nanoteknologian, biologian eta medikuntzan. Felix R. Fischer eta Michael F. Crommie (Kalifornia-Berkeleyko Unibertsitatea eta Lawrence Berkeley National Laboratory) eta Ángel Rubio (UPV/EHUko katedraduna, UPV/EHUko Nano-Bio Spectroscopy Group ikerketa-taldearen burua eta Hanburgoko Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter institutuko zuzendaria) buru dituzten nazioarteko ikertzailez osatutako talde batek erreakzio organiko konplexu baten erreaktiboen, bitartekoen eta produktuen irudiak lortu ditu eta haien loturen konfigurazioa ebatzi du, molekula bakar baten mailan. Nature Chemistry aldizkari entzutetsuak argitaratu du ikerketa hau bere azken zenbakian. Ene-diina molekulek zilar-geruza baten gainean eragiten duten erreakzio konplexuaren etapa guztietako egitura kimikoen irudiak lortu ditu lantaldeak, eta, horretarako, kontakturik gabeko indar atomikoko mikroskopia bat erabili dute (nc-AFM, ingelesezko izenarengatik), zunda bereziki sentikor batekin: eskala atomikoko irtengune txikiak detekta ditzakeen orratz oso fina erabiltzen du (Braillez idatzitako testuak irakurtzen diren bezala); orratzaren puntan, karbono monoxido molekula bat adsorbatzen da, zeinak hatz gisa jokatzen baitu irakurketan, bereizmena handitzeko. Bitarteko espezieen loturen konfigurazioaren identifikazio zehatzari esker, erreakzio-mekanismo osoan gertatzen diren aldaketa kimikoen sekuentzia konplexua argitu ahal izan da, erreaktiboetatik hasi, bitartekoetatik pasatu eta azken produktuekin amaituz, azaldu du Ángel Rubio UPV/EHUko katedradunak, eta, aldi berean, aukera eman du halako portaera dinamiko konplexuan gertatzen diren mekanismo mikroskopikoak ebazteko. Bitartekoak egonkortzea Erreakzio kimiko sekuntzialen zinetika erreakzioen azkartasuna eta erreakzioan izaten diren gertakizun molekularrak aztertzen dituen arloa deskribatzen duten eredu analitiko klasikoaren eta zenbakizko kalkuluaren azken aurrerapenen arteko konbinazioari esker, frogatu dute bitarteko substantziak nola egonkortu diren azaltzeko ez dela nahikoa haien energia potentziala aintzat hartzea, baizik eta funtsezkoa dela kontuan hartzea energia-disipazioa eta entropia molekularren aldaketak entropiak sistema baten antolaketa-maila neurtzen du. Gainazalak eta, bereziki, erabat ezegonkorak diren bitarteko substantziek gainazalarekin dituzten interakzioek oso funtzio garrantzitsua dute bai entropian bai energia-disipazioan, eta, hain zuzen ere, horrek alde handia eragiten du gainazal batean gertatzen diren erreakzioen eta gas-fasean edo disoluzioan gertatzen diren erreakzioen artean. Molekula baten erreakzio kimikoak bistaratzearen eta ordenagailu bidezko

modelizazioan gertatzen diren azken aurrerapenen sinergiari esker lortu da hain xehe ulertzea mekanismoa, eta, hori guztia giltzarri da erreakzio kimikoen analisisian, zehaztu du ikertzaileak. Izan ere, horrekin guztiarekin, teknika espektroskopiko konbentzionalen mugetako asko gainditu dira adierazi du, eta erreakzio-mekanismoak, indar eragileak eta zinetika ordura arte ez bezala eskala atomikoan irudikatzea lortu da. Rubiok azaltzen duenez, jakintza honek guztiak ezin konta ahala arlo berri zabal ditzake, orain arte sekula aztertu gabeak: sistema katalitiko heterogeneoen etorkizuneko diseinuak eta optimizazioak, karbonoaren nanoteknologiari aplikatutako sintesi-tresna berriak garatzea, bai eta materialen zientziako eta biokimikako aplikazioak ere. Informazio osagarria Ikerketa zenbait ikerketa-talderen lankidetzaz gauzatu da: Felix R. Fischer-en eta Michael F. Crommie-ren (Kalifornia-Berkeleyko Unibertsitatea eta Lawrence Berkeley National Laboratory) eta Ángel Rubioren taldeek (UPV/EHUko katedraduna, UPV/EHUko Nano-Bio Spectroscopy Group ikerketa-taldearen burua eta Hanburgoko Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter institutuko zuzendaria). Aipatzekoa da kalkuluak UPV/EHUko Nano-Bio Spectroscopy Group taldeko doktoretza osteko ikertzaile batek, Alejandro Pérez doktoreak, egin dituela, eta Dimas G. Oteyza (DIPC) eta Miguel Moreno Ugeda (Nanogune) Ikerbasque ikertzaileek oso paper garrantzitsua izan dutela Berkeley-n zegoen bitartean egin zituzten esperimenduak. Ángel Rubio UPV/EHUko katedradunak Materialen Zientzia Saila unibertsitatean zuzentzen duen Nano-Bio Spectroscopy Group ikerketa-taldearen jarduerak ardatz hauek ditu: ikerketa teorikoa eta materia kondentsatuaren propietate elektronikoen eta egitura-propietateen modelizazioa; tresna teoriko eta kode konputazional berriak garatzea, solidoek eta nanoegiturek kanpoko eremu elektromagnetikoen aurrean duten erantzun elektronikoa ikertzeko.