



Una investigación diseña un método para el control del movimiento preferencial de moléculas quirales que se desplazan sobre una superficie

- El hallazgo permitiría avanzar significativamente en la funcionalización de nanodispositivos moleculares

Oviedo/Uviéu, 30 de julio de 2019. Un estudio realizado por personal investigador de la Universidad de Oviedo, en colaboración con científicos y científicas del Reino Unido y China, y publicado en la revista “Chemical Science de la Royal Society of Chemistry”, ha diseñado un modelo para controlar el movimiento preferencial de moléculas quirales que se desplazan sobre una superficie. En concreto, cálculos mecánico-cuánticos rigurosos han permitido simular la difusión de una molécula quiral real (BIPEB) sobre una superficie de cobre. Gracias a la energía térmica disponible, BIPEB experimenta desplazamientos siguiendo un mecanismo asimétrico en dos etapas que recuerda al movimiento peristáltico de un gusano.

A pesar de que el coste energético para superar cada etapa es diferente, los dos enantiómeros de BIPEB difunden en condiciones normales siguiendo direcciones aleatorias sobre la superficie, lo que impide su separación de forma espontánea. Los resultados muestran sin embargo que, bajo la influencia de un campo externo oscilante, se puede explotar la asimetría del mecanismo de difusión de BIPEB y conseguir que sus dos enantiómeros difundan en direcciones opuestas. Ajustando los parámetros de este campo externo, el equipo investigador ha sido capaz de controlar la separación y de obtener acumulaciones netas de los conformeros de cada uno de los dos enantiómeros. Proponen así una máquina molecular que resolvería mezclas racémicas.

El hallazgo permite el diseño de guías útiles para el desarrollo de nanodispositivos moleculares. Además, dadas las implicaciones que la quiralidad tiene en el origen de la vida, el entendimiento de este tipo de máquinas moleculares arroja luz en cuestiones fundamentales sobre por qué los sistemas biológicos son homoquirales.



Las manos son el ejemplo más cotidiano de lo que es un objeto quiral. Cada una de las imágenes especulares, no superponible a la imagen original, de una molécula quiral se conoce como enantiómero o isómero óptico. Los enantiómeros van por parejas y solo se distingue de su pareja en que es su imagen especular. Como la mano derecha y la mano izquierda, que son equivalentes en cuanto a su forma y apariencia, pero no son iguales. Una es la imagen especular de la otra y no se pueden superponer.

Controlar su difusión quiere decir que es posible seleccionar el sentido hacia donde se desplazan las moléculas con una quiralidad determinada (el enantiómero “derecho” o el enantiómero “izquierdo”) cuando se depositan sobre una superficie, por ejemplo metálica (cobre), como en este estudio. Inicialmente, sobre la superficie hay una mezcla con los dos enantiómeros en igual proporción. Esta es una mezcla racémica.

En el ámbito de la química orgánica se investiga mucho sobre rutas de síntesis que conduzcan a que el producto final solo contenga moléculas de uno de los dos enantiómeros si el compuesto que se busca es de los que presenta un centro quiral. En el tristemente famoso fármaco llamado Talidomida, las moléculas del compuesto o principio activo tienen un centro quiral y por tanto dos enantiómeros. Uno de ellos produce los efectos sedantes medicinales. El otro fue el causante de las malformaciones con las que nacieron muchos niños y niñas en toda Europa a finales de los 50 y principios de los 60.

El equipo investigador de la Universidad de Oviedo ha descubierto que se pueden separar los enantiómeros por medio de un campo externo oscilante (puede ser un gradiente de temperatura o un campo eléctrico dependiendo de qué compuesto se trate). Los parámetros hacen referencia a la intensidad, la frecuencia, fase, etcétera, de ese campo. Dependiendo de esos parámetros, la separación de los enantiómeros puede ser más o menos efectiva. De esta forma no se necesitaría recurrir a reacciones de síntesis en el laboratorio.

José Manuel Recio, catedrático del Departamento de Química Física y Analítica de la Universidad, explica que “básicamente, las simulaciones computacionales que nosotros realizamos recrean el comportamiento de una mezcla racémica inicial de moléculas que llamamos BIPEB, por las iniciales de su nombre químico, sobre una superficie de cobre. Esta muestra constituye el principio de una máquina molecular porque las moléculas son capaces de moverse libremente por la superficie, siguiendo un mecanismo asimétrico a lo largo de una sola dimensión, gracias a la energía térmica. Las moléculas de BIPEB se mueven aleatoriamente en uno y otro sentido manteniendo el carácter de mezcla racémica. Esto cambia y los dos enantiómeros de BIPEB “pueden separarse si sometemos



a la muestra molecular y a la superficie a la acción externa de un campo oscilante con unas condiciones determinadas”. “Entonces –continúa el profesor– podemos controlar que los enantiómeros “derecha” se vayan hacia un lado de la superficie y los enantiómeros “izquierda” hacia el otro, logrando así su separación”.