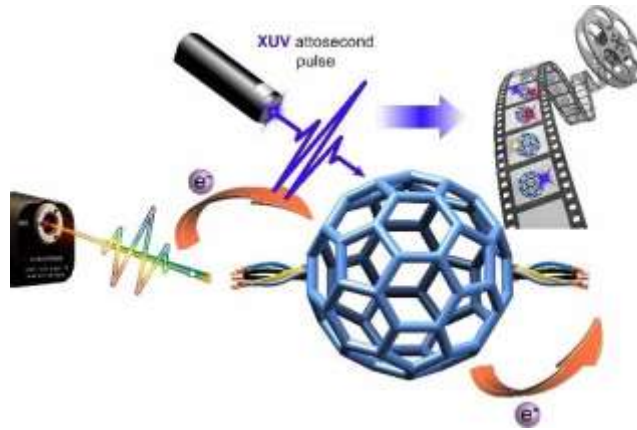




TOMATTO, el proyecto europeo que quiere capturar los electrones en movimiento



- TOMATTO tiene como objetivo capturar la dinámica electrónica ultrarrápida para mejorar la eficiencia de conversión de la energía solar.
- El Consejo Europeo de Investigación (ERC) financia este proyecto Synergy en el que trabajan juntos tres grupos de investigación de España e Italia.
- TOMATTO está coordinado desde el Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA Nanociencia).

Madrid, 16 de mayo, 2023. La curiosidad de las mujeres y hombres ha llevado a la humanidad a descubrir una plétora de fenómenos, forzando las fronteras del conocimiento. El profundo conocimiento de diversos eventos nos ha llevado a desarrollar herramientas y mecanismos que actualmente nos hacen la vida más fácil. Por ejemplo, el registrar eventos en cortos períodos de tiempo nos ha permitido percibir las complejidades de innumerables procesos en mecánica e ingeniería. A una escala muy pequeña, el poder medir en intervalos ultracortos de tiempo nos ha proporcionado información sobre la excitación de moléculas, que a su vez revela las propiedades del material que las contiene, con importantes implicaciones en las potenciales tecnologías aplicadas.

El registro de estos procesos ultracortos nos proporciona una imagen global de cómo se comportan las moléculas y los átomos en un material. Uno de los procesos más relevantes que tienen implicaciones macroscópicas directas es el mecanismo de transferencia de carga que rige la conversión de energía solar. Hoy en día, la eficiencia de dicho proceso está por debajo del 25%, lo que representa un amplio margen de mejora. Como anunció el profesor Feynman en 1959, hay mucho espacio en el fondo (*"there is plenty of room at the bottom"*), y así es en este caso.

El proyecto "TomATTO" -*The ultimate Time scale in Organic Molecular opto-electronics, the ATTOsecond*- nace con el propósito de buscar en una escala de tiempo ultracorta, el attosegundo, **captar el movimiento de los electrones en moléculas orgánicas**. Este ambicioso proyecto tiene como objetivo comprender la



complejidad de la transferencia de carga fotoinducida y optimizar el diseño de nuevos materiales orgánicos para su aplicación en células solares. El diseño de nuevos materiales a medida significaría un gran salto tecnológico que eventualmente podría satisfacer la apremiante demanda de producir energía de manera sostenible.

La misión de TOMATTO

Los procesos fotoinducidos de transferencia de electrones (ET) y transferencia de carga (CT) que ocurren en materiales orgánicos son la piedra angular de las tecnologías destinadas a la conversión de la energía solar en energía eléctrica y a su transporte eficiente. El proyecto TOMATTO tiene previsto examinar más de cerca este problema a través de avances en tres áreas: 1) ciencia de attosegundos, 2) síntesis orgánica y 3) modelización computacional. El objetivo es proporcionar películas claras de los procesos de transferencia de carga con una resolución de tiempo sin precedentes. El objetivo final es adaptar la respuesta molecular de los materiales orgánicos, diseñados para optimizar los procesos iniciados por la absorción de luz, lo que lleva al comportamiento optoelectrónico deseado.

La estrategia habitual para mejorar la eficiencia de las células solares es la modificación química, que se basa en la intuición química y los ensayos de prueba y error. En este sentido, no hay control sobre la dinámica electrónica ultrarrápida inducida por la luz. Lograr esto último no es fácil, ya que la escala de tiempo natural para el movimiento electrónico es el attosegundo (10^{-18} segundos), que es mucho más corto que la duración de los pulsos láser de sondeo, de duración de femtosegundos.



Con los pulsos de femtosegundos se pueden visualizar procesos más lentos, como la isomerización, las vibraciones nucleares o la migración de hidrógeno que ciertamente afectan a transferencias de carga posteriores en escalas de tiempo más largas. Sin embargo, las imágenes en tiempo real del movimiento electrónico son posiblemente la única forma de comprender y controlar completamente las primeras etapas de la transferencia de carga, y por extensión la dinámica electrón-nuclear acoplada que viene más tarde y conduce (o no) a una corriente eléctrica eficiente.

En este proyecto, los científicos proponen superar el cuello de botella de la escala de tiempo de femtosegundos y obtener información directa sobre las primeras etapas de la transferencia de electrones y de carga, generadas mediante la absorción de luz visible y ultravioleta en sistemas optoelectrónicos orgánicos. Al extender las herramientas de la ciencia de attosegundos más allá del estado del arte y combinarlas con los métodos más avanzados de síntesis orgánica y modelado computacional, los investigadores de TOMATTO pretenden revolucionar el campo de la optoelectrónica orgánica, con un impacto obvio en todas las tecnologías relacionadas.

Una resolución temporal sin precedentes

Un electrón tarda unos 150 attosegundos en completar una "órbita" alrededor de un núcleo. El attosegundo (una billonésima parte de un segundo, o 10^{-18} segundos) es, por lo tanto, la escala de tiempo natural en la que tiene lugar el movimiento de los electrones en la materia. Para tener una idea de su



magnitud, un attosegundo es a un segundo lo que un segundo es a la edad del universo. Estas cifras ilustran el desafío científico y técnico de medir eventos en una escala de tiempo tan pequeña.

Sin embargo, tal escala es clave en química. Todas las reacciones químicas abarcan la ruptura y la formación de enlaces entre átomos. Y los responsables de que los enlaces se formen o rompan son los electrones. Por lo tanto, la reactividad química es un proceso dinámico resultante del movimiento combinado de electrones y núcleos atómicos. Acceder a la escala de tiempo de attosegundos significa abrir la posibilidad de alterar los enlaces químicos de una molécula y, por lo tanto, sus características químicas y reactividad, nada más y nada menos..

Acceder a la escala de tiempo de attosegundos significa abrir la posibilidad de alterar los enlaces químicos de una molécula y, por lo tanto, sus características químicas y reactividad..

El uso de láseres de attosegundo abrirá la posibilidad de producir sustancias que no pueden ser sintetizadas por procesos tradicionales, así como suprimir reacciones no deseadas que ocurren naturalmente.

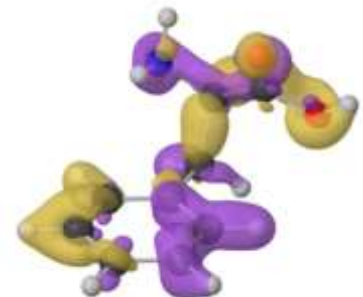
En particular, el proyecto TOMATTO tiene como objetivo revelar el papel de la dinámica electrónica temprana inducida por la luz visible y ultravioleta en las corrientes eléctricas producidas en materiales orgánicos a mayor escala de tiempo. ¿Cómo afectan la dinámica electrónica temprana y su interacción con la dinámica nuclear a tales corrientes eléctricas? ¿Y cómo esta dinámica de carga de electrones puede ser manipulada por modificación química para mejorar la eficiencia de los procesos de transferencia de carga en una escala de tiempo más larga? Con este fin, los esfuerzos sinérgicos entre físicos láser, químicos orgánicos y teóricos son obligatorios.

Tres grandes desafíos interconectados

La generación de corrientes eléctricas que impulsen las actividades humanas de manera sostenible es una prioridad para la humanidad. En este sentido, controlar las complejidades de los procesos de transferencia de carga en materiales orgánicos es fundamental para mejorar la eficiencia de la conversión de energía en dispositivos de energía solar. Dado que las primeras etapas de estos procesos ocurren en escalas de tiempo ultrarrápidas -en attosegundos-, su acceso es un desafío técnicamente complejo.

El proyecto TOMATTO se enfrenta a tres grandes desafíos interconectados que implican conocimientos muy diversos. Primero, registrar y comprender los primeros procesos electrónicos iniciados por la absorción de luz en moléculas y su dependencia de la estructura molecular. En segundo lugar, diseñar nuevos sistemas moleculares como un método eficaz para adaptar y controlar la dinámica electrónica inicial. Y tercero, desarrollar métodos computacionales avanzados y no convencionales para racionalizar las observaciones y guiar la investigación experimental.

Debido a la fuerte interconexión entre estos tres objetivos, el proyecto TOMATTO implica un esfuerzo interdisciplinar, donde los enfoques innovadores en diferentes áreas de investigación deben ser puestos en común. Esto es posible gracias al trabajo sinérgico de los tres equipos de





investigación del Prof. Fernando Martín (IMDEA Nanociencia, Universidad Autónoma de Madrid), el Prof. Nazario Martín (Universidad Complutense de Madrid) y el Prof. Mauro Nisoli (Politecnico di Milano).

La retroalimentación continua entre el modelado computacional, la síntesis orgánica y los desarrollos de líneas de luz de attosegundos es la clave para encontrar las respuestas a las preguntas que plantea el proyecto TOMATTO. La combinación de la ciencia de attosegundos, la síntesis orgánica y el modelado computacional permitirá a los investigadores de TOMATTO capturar la dinámica electrónica ultrarrápida con el objetivo de mejorar la eficiencia de conversión de energía solar.

Un consorcio sinérgico

Fernando Martín, coordinador de TOMATTO, es Profesor Asociado de Investigación en IMDEA Nanociencia y Profesor de Química Teórica en la Universidad Autónoma de Madrid (España). Su grupo de investigación se centra en el estudio teórico de la dinámica en sistemas cuánticos aislados, produciendo predicciones teóricas e interpretaciones que puedan conducir a una mejor comprensión de estos sistemas, siguiendo de cerca los hallazgos experimentales, así como a proponer nuevas situaciones experimentales.

Nazario Martín es Catedrático de Materiales Moleculares Orgánicos en la Universidad Complutense de Madrid y Vicedirector de IMDEA Nanociencia (España). Su grupo de investigación se centra en las nanoestructuras de carbono como materiales para la preparación de sistemas moleculares orgánicos funcionales fotoactivos y electroactivos.

Mauro Nisoli es profesor de Física en el Politecnico di Milano (Italia). Su actividad de grupo de investigación se centra en el desarrollo de nuevas fuentes láser para la generación de pulsos ópticos ultracortos (en régimen de femtosegundos) y su aplicación al estudio de procesos dinámicos en materiales.

Un proyecto europeo coordinado desde Madrid

El proyecto TOMATTO está financiado por el Consejo Europeo de Investigación (ERC) a través de una Synergy Grant que promueve las investigaciones cooperativas de grupos de investigación que trabajan en campos complementarios. El objetivo es apoyar una estrecha colaboración que conduzca a una fecundación cruzada fructífera de disciplinas capaces de producir resultados innovadores sobre problemas de alta relevancia científica.

En palabras del Prof. Nazario Martín "cabe destacar la iniciativa de la Comunidad de Madrid de convocar en 2018 ayudas para la puesta en marcha de Proyectos Synergy en I&D, que animaron a los grupos beneficiarios a presentar propuestas a las Synergy Grants del CEI, y ha sido fundamental obtener la financiación del ERC".

IMDEA Nanociencia es un centro internacional centrado en el desarrollo de la investigación de vanguardia en Nanociencia y Nanotecnología en relación con industrias innovadoras. La multidisciplinariedad del Instituto contribuye a resolver problemas de gran importancia estratégica para las empresas y otras instituciones públicas, a partir de una mejor comprensión de los fenómenos a nanoescala. El Prof. Rodolfo Miranda, Director de IMDEA Nanociencia y Catedrático de Física de la UAM, afirma: "el esquema que ofrece nuestro Instituto es la base idónea para coordinar este consorcio ERC Synergy que representa para el Instituto, e igualmente para ambas universidades, un importante salto cualitativo del que Madrid en su conjunto se beneficiará al atraer fondos competitivos y capital humano a nuestra región".



Mas información

<https://tomatto.eu/>

<https://youtu.be/LUxMttE6K8M>



TOMATTO project has received funding from the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (grant agreement No. 951224).

El proyecto TOMATTO ha recibido financiación del Consejo Europeo de Investigación (ERC) bajo el programa de investigación e innovación Horizonte 2020 de la Unión Europea (acuerdo de subvención nº 951224).



Contact

IMDEA Nanociencia Dissemination and Communication Office

divulgacion.nanociencia@imdea.org

+34 91 299 87 12

Twitter: @imdea_nano @tomattosecond

Facebook & Instagram: @imdeananociencia

Source: IMDEA Nanociencia

License: Creative Commons CC-BY