

NANOQUÍMICA Y NANOTECNOLOGÍA: NUEVOS MATERIALES, POLÍMEROS Y MÁQUINAS MOLECULARES

Tomás Torres Cebada

*Catedrático y Director del Departamento de Química Orgánica.
Universidad Autónoma de Madrid*

INTRODUCCIÓN

Los químicos han aprendido cómo controlar el tamaño y la forma de una gran variedad de materiales a escala molecular. Así, a través de estrategias denominadas "de abajo a arriba" (Bottom-Up) han sintetizado materiales moleculares y polímeros que presentan propiedades físicas de extraordinario interés. La nanoquímica constituye una herramienta de valor incalculable para la elaboración de máquinas moleculares artificiales. El químico pronto podrá proveer a los físicos del estado sólido y a los ingenieros electrónicos de "pequeñas piezas" (sistemas autoensamblados) que podrán utilizarse como "ladrillos" a escala molecular para la construcción de dispositivos electrónicos y electro-ópticos, miniaturizados con respecto a los actualmente utilizados.

Durante los últimos años la química ha evolucionado hacia un modelo multidisciplinar que ha llevado a la fusión de los campos clásicos, representados por la química orgánica, la química inorgánica, la química-física, la química analítica y la química teórica. Por otra parte, se han desarrollado extraordinariamente las interfases entre la química y otras áreas científicas como la física, la biología y la ciencia de materiales. Campos relativamente nuevos como la química supramolecular, los materiales moleculares y los polímeros funcionales, entre otros, son aportaciones de la química a disciplinas emergentes englobadas dentro del término nanociencia.

Los términos "Nanociencia" o "Nanotecnología" hacen referencia al desarrollo científico y tecnológico que se viene produciendo en las últimas dos décadas, y que ha permitido la construcción y manipulación de materiales en la escala del nanometro. La nanotecnología trata con estructuras y sistemas que poseen tamaños desde 1 a 100 nanómetros. Todo este desarrollo promete un impacto social y económico mayor en varios órdenes de magnitud que el proporcionado por la tecnología "submicrométrica", que es la base de la electrónica moderna y de las amplias capacidades de telecomunicación que existen actualmente (Véase *Science*: www.sciencemag.org, Monográfico sobre nanotecnología de 29 de Marzo de 2002).

La nanociencia se puede definir como el conjunto de conocimientos y metodologías dirigidos a fabricar, estudiar y caracterizar estructuras funcionales dentro del rango de los nanómetros. Esto incluye el análisis de propiedades químicas, estructurales, mecánicas, eléctricas, ópticas o magnéticas, el estudio de las interacciones con otras nanoestructuras, su interacción con ondas electromagnéticas, etc.

Los científicos han aprendido cómo controlar el tamaño y la forma de una gran variedad de materiales a escala atómica y molecular, descubriendo con ello un buen número de propiedades potenciales de estos materiales, muchas de ellas de carácter no convencional. El advenimiento de nuevas técnicas analíticas como la microscopía de efecto túnel, entre otras, han impulsado estos estudios. Actualmente existe un decidido interés, en áreas relacionadas con la ingeniería electrónica y la biología, por entender y controlar los fenómenos físicos y químicos en la escala nanométrica.

La miniaturización de los componentes utilizados en la construcción de los dispositivos, por ejemplo en microelectrónica, ha obligado a los físicos del estado sólido y a los ingenieros electrónicos a manipular "piezas de materia" cada vez más pequeñas, lo que se conoce como la aproximación "top-down" (de arriba a abajo), que tiene limitaciones intrínsecas. Una estrategia alternativa es la

denominada “bottom-up” (de abajo a arriba), que consiste en construir a partir de las menores “piezas de materia” conocidas, como son los átomos y las moléculas, entidades supramoleculares en la escala nanométrica con propiedades específicas. Esto es, además de la miniaturización de los componentes electrónicos, la nanotecnología contempla la posibilidad de manipular estructuras a escala molecular y dotarlas de nuevas propiedades que no se encuentran en los materiales convencionales.



D. Tomás Torres Cebada

La investigación en la escala nanométrica está unificada por la necesidad de compartir conocimientos entre los científicos de distintas especialidades sobre las interacciones atómicas y moleculares (nanociencia), así como el desarrollo de herramientas y técnicas para construir y manipular los sistemas nanoestructurados (nanotecnología).

MATERIALES MOLECULARES Y POLÍMEROS FUNCIONALES

El último medio siglo se ha definido como la época de los plásticos (polímeros), pero también como la de los semiconductores y la microelectrónica. Pues bien, la superposición de ambas áreas será, con toda probabilidad, uno de los soportes básicos sobre los que se asiente la tecnología más avanzada del siglo XXI.

Los materiales moleculares y polímeros que presentan “propiedades no convencionales” (fundamentalmente propiedades eléctricas, ópticas o magnéticas) han sido objeto de atención por parte de una amplia comunidad científica internacional durante las últimas tres décadas. Este interés se basa en las potenciales aplicaciones que estos materiales pueden tener en áreas tan diversas como la química, la biología, la física o, en general, la ciencia de materiales. Se trata pues de un campo altamente interdisciplinar cuyo progreso ha dependido, en gran medida, de las interacciones entre disciplinas fundamentales.

Los materiales moleculares están constituidos por unidades moleculares, las cuales pueden ser sintetizadas aisladamente, y organizadas posteriormente en algún tipo de fase condensada capaz de presentar propiedades físicas no convencionales.

El reconocimiento de este desarrollo ha venido dado por la concesión en 2000 del Premio Nobel de Química a los estadounidenses Alan J. Heeger y Alan G. MacDiarmid (neozelandés de nacimiento), y al japonés Hideki Shirakawa por el descubrimiento y desarrollo de los polímeros

conductores. Las espectaculares propiedades eléctricas y ópticas de estos polímeros, de origen orgánico, han generado una dedicación intensa de químicos, físicos y tecnólogos en los últimos años con el fin de sintetizar este tipo de materiales, estudiar sus propiedades y aplicarlos industrialmente. Son muchas las aplicaciones: células solares, transistores orgánicos, fotodiodos, pantallas de teléfonos móviles y televisores de pequeño formato y blindajes electromagnéticos, por citar sólo algunas.

La electrónica molecular está en la base de todas ellas. La posibilidad de producir componentes electrónicos formados por moléculas orgánicas individuales, permitirá, como se ha dicho ya anteriormente, no sólo la reducción del tamaño de los ordenadores y otros sistemas electrónicos sino también aumentar la velocidad de transmisión de la información. Muchos de estos materiales moleculares orgánicos y polímeros son de fácil acceso por síntesis orgánica convencional. Como muestra de la viabilidad industrial de sus investigaciones Alan J. Heeger ha fundado una empresa, Uniax Corporation, que produce este tipo de polímeros y desarrolla sus aplicaciones. Este modelo de investigador, muy extendido ya en EE.UU., se está imponiendo en Europa.

Nuestro país no ha sido ajeno a este espectacular desarrollo científico. Así, en junio de 1992 se celebró en Peñíscola la I Escuela Nacional de Materiales Moleculares, organizada por Eugenio Coronado, con el propósito de hacer interaccionar a los científicos españoles que, desde diferentes áreas, se dedicaban al estudio de los materiales moleculares. El segundo objetivo fundamental de ésta primera y siguientes escuelas: Rialp 1994 (Jaime Veciana), Jaca 1996 (Fernando Palacios), El Escorial 1999 (Nazario Martín y Tomás Torres) y Peñíscola 2001 (Enrique Ortí) era el de difundir estos conocimientos entre los investigadores más jóvenes de nuestra comunidad científica, con el fin de establecer una base sólida sobre la que pudiese desarrollarse este campo en un futuro.

Los contenidos tratados en estas escuelas han sido muy variados incluyendo la preparación, estudio de propiedades y aplicaciones de materiales moleculares con propiedades conductoras, cristales líquidos, materiales orgánicos para óptica no lineal, materiales con propiedades magnéticas, etc., que han sido tratados junto a otras moléculas de interés como son los fullerenos, rotaxanos o dendrímeros, así como la aplicación de materiales polímeros en el estudio de “propiedades no convencionales”, como contrapunto al estudio de los materiales moleculares. Igualmente, técnicas útiles en el estudio de materiales como las voltamperométricas, la formación de capas ultrafinas de Langmuir-Blodgett (LB), la espectrometría de masas o el uso de microondas, han sido objetos de atención permanente a lo largo de estas reuniones (Véase por ejemplo, P. Vázquez, T. Torres y N. Martín, “Los materiales moleculares en España en el umbral del siglo XXI”, Ediciones Universidad Autónoma de Madrid, 2001).

Es importante destacar el papel que en la ciencia de materiales juega la síntesis orgánica. En este sentido recientes publicaciones han puesto de manifiesto magníficos ejemplos de desarrollos sintéticos dirigidos a la modificación estructural de moléculas orgánicas, con el fin de acceder o mejorar una propiedad física determinada. Además, el incremento habido en el conocimiento de los procesos de autoensamblado y auto-organización ha permitido la construcción de máquinas moleculares artificiales a través del desarrollo de nuevos métodos de síntesis no covalente. Por otra parte, la aplicación de métodos de asistencia supramolecular a la síntesis covalente ha puesto de manifiesto su gran poder como herramienta de trabajo.

La nanotecnología, y con ella la nanoquímica, va a ser impulsada extraordinariamente dentro del VI Programa Marco de la Unión Europea, que está terminando de perfilarse en la actualidad, existiendo ya en Europa y en España un gran número de redes investigadoras dedicadas a aunar sus esfuerzos en esta área.

MÁQUINAS A ESCALA MOLECULAR

“What would be the utility of such machines? Who knows? I cannot see exactly what would happen, but I can hardly doubt that when we have some control of the arrangement of things on a molecular scale we will get an enormously greater range of possible properties that substances can have, and of different things we can do”.

Richard P. Feynman Eng. Sci. 1960, 23, 22-36, Saturday Rev. 1960, 43, 45-47.

"¡Hay muchísimo espacio al fondo!" dijo el Premio Nobel de Física R. Feynman en una, ya clásica, conferencia en el congreso anual de la Sociedad Americana de Física el 29 de diciembre de 1959. El "fondo" último de un material es el ámbito molecular y esta frase se ha convertido en el emblema para muchos químicos cuya investigación consiste en diseñar y construir máquinas y materiales moleculares funcionales. La idea conductora es preparar sistemas moleculares que sean capaces de ejecutar una acción tras un estímulo externo. Así, numerosos ejemplos han sido descritos en los últimos años, informando de la preparación de interruptores, ábacos, músculos y motores moleculares.

El montaje de estas máquinas moleculares se basa en la comprensión y el conocimiento de las débiles fuerzas intermoleculares, a los que se ha llegado en la química supramolecular. El creciente interés en química supramolecular, después de la concesión del premio Nobel de Química en 1987 a Pedersen, Cram y Lehn, ha estimulado la investigación en este área. La química supramolecular o la química más allá de la molécula, como definió Jean-Marie Lehn, está basada en el estudio de las interacciones intermoleculares no covalentes y cubre tanto aspectos estáticos, como el reconocimiento molecular, como dinámicos, por ejemplo los fenómenos de extracción y transporte selectivo a través de membranas.

Interacciones tales como el enlace por puentes de hidrógeno, transferencia de carga y fuerzas de Van der Waals han sido usadas para organizar y dirigir el ensamblado de sistemas moleculares. Estas interacciones son también responsables de la absorción de moléculas huéspedes en el interior de soportes adecuados, dando lugar a una química supramolecular en la cual las propiedades moleculares de una especie en un medio inerte se controlan a menudo de una forma dramática por las características del soporte.

Este tema ha sido el objeto de un Simposio Internacional que ha tenido lugar el pasado mes de marzo en Valencia con el nombre de *Nanoquímica: Máquinas y sistemas supramoleculares*, dirigido a presentar el estado de la técnica y las potenciales aplicaciones de este área de la química, al que han asistido algunos de los más relevantes científicos internacionales que trabajan en ella, como Vincenzo Balzani y Fraser Stoddart. El Simposio, auspiciado por la Fundación Ramón Areces, ha sido organizado por Avelino Corma, director del Instituto de Tecnología Química de la Universidad Politécnica de Valencia - Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

Dentro de este campo, los químicos han extendido el concepto de máquina macroscópica a escala molecular. Una "*máquina a escala molecular*" puede definirse como el ensamblado de un número dado de componentes moleculares que han sido diseñados para realizar movimientos mecánicos (output) como resultado de una estimulación externa apropiada (input).

Al igual que sus equivalentes macroscópicos, una máquina molecular se caracteriza por el tipo de energía suministrada para hacerla trabajar, la naturaleza de los movimientos de sus componentes, el modo en que su funcionamiento puede ser monitorizado y controlado, la capacidad para hacer que repita su funcionamiento de una forma cíclica, la escala de tiempos necesaria para realizar un ciclo completo de movimientos, y el propósito de este funcionamiento.



Conferenciantes en el Simposio Internacional sobre NANOQUÍMICA: MÁQUINAS Y SISTEMAS SUPRAMOLECULARES, celebrado en Valencia en Marzo de 2002. De Izquierda a Derecha, arriba: Toribio Fernández Otero, Hermenegildo García, José Luis Serrano, Vincenzo Balzani, B. L. Feringa, Jean Pierre Sauvage y Andrew B. Holmes, abajo: Tomás Torres, Avelino Corma, Nazario Martín, Mercedes Alvaro y J. Fraser Stoddart

Sin duda, la mejor energía de entrada para hacer trabajar las máquinas moleculares son los fotones y los electrones. Verdaderamente, con reacciones químicas debidamente escogidas, controladas de manera fotoquímica y electroquímica, es posible diseñar y sintetizar máquinas moleculares que produzcan un trabajo.

V. Balzani, J.F. Stoddart y colaboradores (*Angew.Chem. Int Ed.* 2000, 39, 3348-3391) han analizado recientemente toda esta problemática, presentando una vista unificada del campo de las máquinas moleculares, valorando los logros pasados, las limitaciones presentes y las perspectivas futuras. En esta revisión se analizan algunos ejemplos importantes de máquinas moleculares naturales, junto con los desarrollos más significativos en el campo de las máquinas moleculares artificiales.

Investigadores como J. F. Stoddart y James R. Heath en la Universidad de California, Los Ángeles (UCLA), han venido esforzándose en demostrar que puede construirse un rudimentario nanoordenador utilizando moléculas orgánicas. Básicamente el proyecto que desarrollan estos investigadores consiste en hacer interaccionar conjuntamente docenas de "interruptores moleculares" y "nanocables" en circuitos lógicos y circuitos de memoria, permitiendo que se comuniquen entre sí. Los interruptores moleculares con los que estos investigadores de UCLA están experimentando son catenanos, rotaxanos y pseudorotaxanos con centros redox-activos desarrollados durante la última década en el laboratorio de Stoddart. Este tipo de sistemas pueden adquirir dos posiciones o conformaciones diferentes que representan los estados digitales "1" y "0", que pueden conmutarse por aplicación de voltajes adecuados. Para conectar los interruptores moleculares el equipo de UCLA está explorando el uso de nanocables de silicón y nanotubos de carbono.

Una aproximación muy diferente para construir ordenadores moleculares "desde el fondo" está siendo perseguida en Houston por James M. Tour y colaboradores, los cuales han sintetizado cables y mecanismos moleculares basados en anillos bencénicos funcionalizados, alternados con grupos

acetilénicos, dando origen a cadenas conjugadas, en las cuales se ha podido medir el flujo de pequeñas corrientes eléctricas.

Los procesos de autoensamblado en que se basan las anteriores aproximaciones a ordenadores moleculares son inherentemente imperfectos, esto es, no puede garantizarse que una molécula particular terminará siempre en la posición correcta y con la orientación adecuada dentro de un sistema organizado. Pero esto no importa, porque ambos diseños son altamente tolerantes a defectos, lo que contrasta fuertemente con los ordenadores actuales, que pueden dejar de funcionar por un simple elemento defectuoso.

CONCLUSIÓN

La nanoquímica se está desarrollando de manera espectacular, y no cabe duda que podrá proveer en un futuro próximo a los tecnólogos de una generación de materiales funcionales e innovadores, los cuales encontrarán aplicación en nanoelectrónica, fotónica, almacenamiento de información y en la construcción de nuevas generaciones de ordenadores, entre otras. La revolución que se avecina está comenzando por logros sencillos.