

EL MUNDO A ESCALA ATÓMICA: UNA REALIDAD CON PROYECCIÓN INTERDISCIPLINAR

Marcos Manuel Sánchez Sánchez
Licenciado en CC. Químicas. Investigador

HACIA LO INFINITAMENTE PEQUEÑO: UNA VISIÓN INTRODUCTORIA

Tanto como millonésimas de milímetro. Ese es el orden de magnitud de los nuevos materiales moleculares de aplicaciones sorprendentes, lo que ha dado origen a palabras como *Nanociencia* y *Nanotecnología*. Para hacernos una idea: una hormiga mide alrededor de 1 cm (10⁻² metros), una célula 20 micrometros (10⁻⁶ metros), un orgánulo del interior de la célula como el ribosoma mide 25 nanometros (25 x 10⁻⁹ metros). Para apreciar lo pequeño que es un átomo: un átomo es un 1/10.000 del tamaño de una bacteria, a su vez un 1/10.000 del tamaño de un mosquito. En un nanómetro cúbico caben 258 átomos de carbono.

Se ha escrito bastante en los últimos años sobre los denominados *nanocompuestos*, y es que hay que reconocer que ese término engloba una enorme diversidad de sustancias con un más que prometedor futuro en muy diversas aplicaciones.

Actualmente se trabaja intensamente en la preparación y el estudio de nuevos materiales moleculares y supramoleculares que manifiesten propiedades químicas y/o físicas, eléctricas, magnéticas y ópticas, entre otras, para su utilización como dispositivos químicos nanoscópicos. Estos tienen aplicación en la Electrónica Molecular o en Biomedicina como máquinas a escala atómica con funciones de *limpieza de arterias* dañadas por la arterioesclerosis, reparadores de ADN, re-constructores de células o “vasculocitos para la prevención de ataques cardíacos por obstrucción de las arterias.

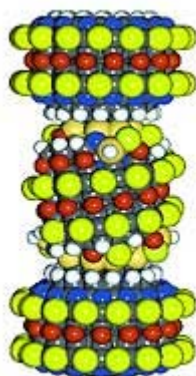


Figura 1. *Simple Pump Selective for Neon*
(www.imm.org Institute for molecular manufacturing)

Hablamos de moléculas “engranadas” mecánicamente, con las que se han diseñado los *motores moleculares*, los *interruptores nanoscópicos* o sistemas de *almacenamiento de la información* a escala atómica. Se trata, principalmente, de los *catenanos*, los “*nudos*” (del inglés *knots*) y los *rotaxanos*, formados por anillos o macrociclos entrelazados atravesados por un “hilo” en línea recta y que se pueden “ensamblar” entre sí.

Según *David A. Leigh & Aden Murp*, de la Universidad de Warwick, Coventry, en su artículo *Molecular Tailoring: the made-to-measure properties of rotaxane*, publicado en *Chemistry & Industry* el 1 de Marzo de 1999, el bloque de componentes engarzados puede manifestar un comportamiento distinto al de los “ladrillos” individuales. Incluso puede presentar propiedades totalmente nuevas. Los

macrociclos protegen al hilo molecular central como una funda que los preserva de agentes externos. Así, según los mismos autores, se consigue obtener *pigmentos fotorresistentes*, con la posibilidad adicional de obtener hilos más largos, estables, que pueden usarse como “*cables*” *moleculares*.

El proceso de formación del rotaxano es reversible, de modo que es posible recuperar el macrociclo y aislarlo. Esto permitiría la existencia de moléculas “con memoria de forma” que según el ambiente que las rodea, adoptan una configuración u otra, es decir, “recuerdan” la forma preferida. Lo anterior abre la puerta al desarrollo de los *interruptores moleculares*, de los que hablaremos más adelante.

Cambiando las interacciones entre el hilo y los anillos que lo rodean, pueden variarse selectivamente las propiedades moleculares.

Si lo que se cambia es “la cara” que presentan al ambiente externo, mediante un estímulo adecuado se pueden obtener moléculas “inteligentes”, como las “*lanzaderas*” *moleculares*: estos rotaxanos presentan dos estaciones o sitios de reconocimiento en el hilo entre los cuales el macrociclo es libre de desplazarse. Manipulando su afinidad por cada sitio pueden así los químicos ejercer un alto grado de control sobre este movimiento submolecular.

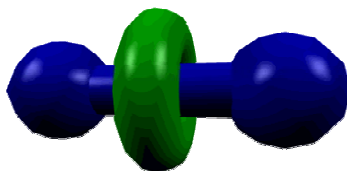


Figura 2. Representación generada por ordenador de un rotaxano, un anillo (macrociclo) cerrado en torno a un eje.

(Del documento HTML adaptado por el autor Matthew Carroll de su informe 'Towards the Synthesis of a [2]catenane' sobre un trabajo de investigación realizado en la Birmingham University (Julio-Agosto 1998)

El anillo está “contenido” en el eje y no se sale de él gracias a grupos químicos voluminosos, formados generalmente por diez o más anillos bencénicos incorporados a cada extremo. Lo importante a destacar es que no hay interacciones químicas entre el eje y el anillo.

Según el mencionado artículo de David A. Leigh, también se ha comprobado que al irradiar con luz el macrociclo una vez ha sido incorporada al mismo una molécula *fotoexcitable* $[Ru(bipy)_2]^{2+}$, esta es violentamente expelida de la cavidad, comportándose como una especie de *pistón molecular propulsado por la luz*.

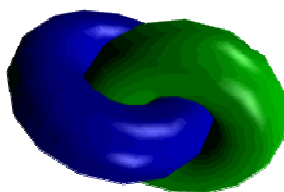


Figura 3. Representación generada por ordenador de un catenano (dos o más anillos químicos entrelazados)

El catenano se mantiene íntegro porque los dos anillos están entrelazados, como los eslabones de una cadena, y al igual que estos, no pueden ser separados sin romper al menos uno de ellos.

Esto añade un grado de libertad rotacional no asequible a otros sistemas, lo que puede encontrar aplicación en el desarrollo de nano-dispositivos como los nuevos sistemas de almacenaje de información, las *computadoras moleculares*.

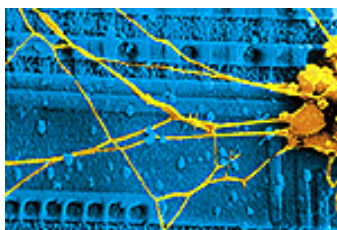
NANOCOMPUTADORAS ELECTRÓNICAS QUÍMICAMENTE ENSAMBLADAS (CAEN)

Los científicos de los laboratorios Hewlett-Packard en Palo Alto, California y en la Universidad de California en Los Angeles (UCLA) están desarrollando computadoras muy, muy pequeñas. Tanto como que una de ellas cabría en un grano de arena. Estas nuevas computadoras son, en realidad, moléculas.

¿Pueden ser las computadoras tan diminutas? Todas las computadoras están basadas en un interruptor de encendido-apagado. Los científicos han desarrollado un rotaxano que actúa como tal interruptor:

El rotaxano es "insertado" entre dos cables cruzados. Cuando la molécula está en la posición de "apagado", un electrón puede brincar desde un cable hasta la molécula y luego desde ésta hasta el otro cable. Como el viajero que se vale de un puente para cruzar un río. Imaginemos que el puente fuese móvil: para crear la posición de "encendido" los científicos aplican un campo eléctrico entre los cables. Entonces, el electrón ya no puede brincar tan fácilmente. El puente ya no está allí.

Los científicos también están tratando de crear *cables más pequeños* para ser usados con estas nuevas moléculas. Han estirado *tubos de carbono* hasta formar hilos delgados de un nanómetro de ancho. Diez mil veces más finos que un cabello, son el resultado del arrollamiento de capas de átomos de carbono distribuidos en el espacio según la estructura hexagonal típica de su sistema cristalino. Descubiertos en 1991 por un investigador de la NEC, estarían destinados a ser conectores a escala atómica en dispositivos electrónicos.



Los científicos planean introducir capas de moléculas de rotaxano en el interior de computadoras ultra potentes. Las nuevas computadoras serán mucho más pequeñas y 100 billones de veces más rápidas que las que usamos en la actualidad. También serán más económicas. Se llaman "nanocomputadoras electrónicas químicamente ensambladas" y sus siglas en inglés son CAEN (chemically assembled electronic nanocomputers).

(www.harcourtschool.com/newsbreak/invisible_spn.html Harcourt School publishers)

Se cree que los científicos necesitarán dos años más para fabricar la primera CAEN. Y pocos años después podrían venir ya las primeras CAEN a la venta para todo el público. Quizá algún día dispongamos de una en nuestros hogares.

Uno de los grandes retos a los que se enfrentan los científicos en la actualidad es que cada molécula de rotaxano sólo puede ser usada una vez. Por ello, sirve únicamente para almacenar información en la memoria de sólo lectura o memoria ROM (read-only memory). Un ejemplo de memoria ROM es la utilizada para guardar en soporte CD-ROM una enciclopedia. Puede ser leída pero no modificada.

La molécula de rotaxano no puede ser usada para almacenar datos en la memoria de la computadora que se cambia una y otra vez: la memoria de acceso aleatorio usada en procesadores de texto o memoria RAM (random-access memory). Los científicos están tratando de desarrollar una molécula que pueda utilizarse cuantas veces sea necesario.

Estas computadoras microscópicas, incorporadas por ejemplo al torrente sanguíneo de una persona, podrían identificar bacterias que no son mayores que ellas. Así se conocerían los fármacos específicos para combatir infecciones. Una entre miles de posibilidades.

Phil Kuekes es un arquitecto de computadoras Hewlett-Packard y un investigador de CAEN. "Eventualmente", dice, "las computadoras serán tan pequeñas que ni siquiera las notaremos. La computadora no estará solamente en tu reloj de pulsera; estará en las fibras de tu ropa".

En 1964, Gordon Moore, uno de los socios fundadores de Intel, formuló una ley, la *famosa Ley de Moore*, aceptada universalmente durante las últimas tres décadas: "El número de transistores que caben en un chip de silicón se dobla cada 18 meses". Dicha ley recibe retoques de cuando en cuando. El coeficiente multiplicador anual de la densidad se mantuvo en el valor 2 desde 1958 hasta 1972, se redujo a 1.6 desde entonces hasta 2010 (estimativo) y se cree que pasará a valer 1.16 desde esta última fecha en adelante, hasta alcanzar los límites de la Física (véase Figura 4).

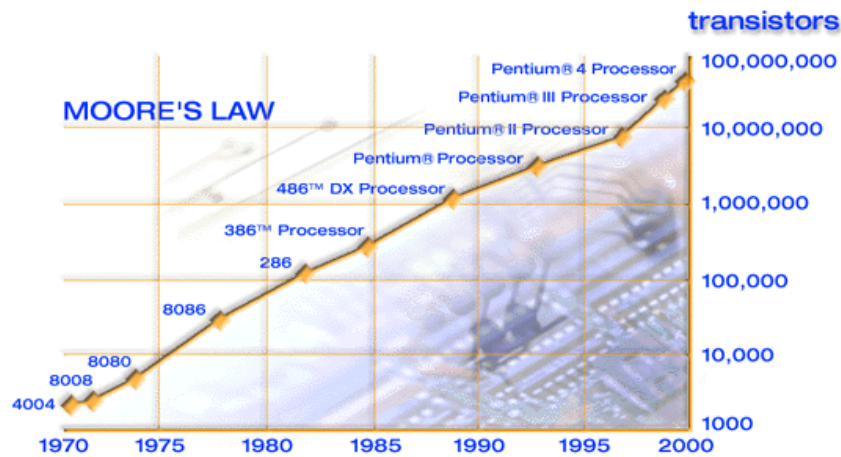


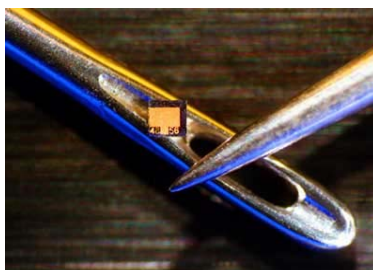
Figura 4

La primera necesidad que impulsó la miniaturización de circuitos electrónicos surgió de los programas de cohetes balísticos (lectura.ilce.edu.mx:3000/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/112/htm/sec_31.htm) "Electromagnetismo: De la Ciencia a la Tecnología" Autor: Eliezer Braun), debido a su limitada capacidad de carga. La *microtecnología* fue desarrollándose paulatinamente y se aplicó de forma inmediata a computadoras comerciales, lo que redujo enormemente el tamaño de sus procesadores.

Moore acertó plenamente. Los pasos de gigante dados en el desarrollo de la informática han supuesto un fulgurante avance en la tecnología aplicada a los aparatos electrónicos. En los años 70, los primeros chips contenían unos 2300 circuitos. Actualmente un Pentium 4 contiene más de 42 millones. (mssimplex.com/microprocesador.htm página: Microsistemas información actualizada sobre computación e Internet Servicio de soporte técnico gratuito actualizado en 22-noviembre-2002)

Pero al cabo de esos treinta años la microinformática parecía haber tocado fondo. www.toptutoriales.com/tecno/articulos/articulo1.htm Chips moleculares, el reino de Lilliput Autor: J. Antonio Pascual Estapé (extraído de PCManía online) Es probable que en un plazo de tiempo más cercano a nosotros de lo que imaginamos se fabriquen chips de 50 átomos de ancho, si bien las leyes

de la física impiden que el método tradicional de impresión del transistor por la luz pueda llegar a operar a escala menor.



La razón: es sabido que los ordenadores sólo entienden la lógica binaria, es decir, los valores 0 ó 1, llamados *bits*, que no es más que un *convenio sobre si pasa o no corriente* eléctrica. Los bits a su vez se agrupan en *bytes*, y se codifican de manera especial para dar lugar a los lenguajes de programación. Los programadores utilizan estos lenguajes para crear los programas, con los que dan instrucciones al ordenador sobre lo que tiene que hacer.

A continuación, dichos programas se traducen al lenguaje binario o *código máquina*, que es el único que entiende el ordenador. Desde un punto de vista físico, el valor 0 ó 1 de un bit se procesa en el ordenador mediante un interruptor de apagado o encendido. Estos interruptores son los conocidos *transistores de tipo MOS* (Metal Oxide Semiconductor) donde una corriente de electrones se conduce a través de una “puerta” que permite el paso desde el óxido (aislante) al metal (silicio, semiconductor). Idea clave de los chips: estos transistores se almacenan en *circuitos integrados* (integran en la misma pieza de semiconductor todos los componentes de un circuito eléctrico: transistores, diodos, resistencias, condensadores, etc...) , los cuales están hechos enteramente de silicio. *Hay 100 millones de transistores por chip*. Para crearlos, un rayo de luz graba las obleas de silicio, (ispjae.edu/cu/gicer/Boletines/4/137/bol137.htm Boletín de redes nº 137) proceso que se conoce con el nombre de *fotolitografía*. Esto genera un problema si lo que se quiere es alcanzar dimensiones cada vez menores: habría que utilizar una radiación de longitud de onda inferior a la de la luz, es decir *los rayos X*, los cuales alterarían la materia, la composición de los átomos y el método utilizado.

A pesar de esta evidencia, en 1999 desde la Universidad de California en los Ángeles nos llegó otra luz, la que arrojó el grupo de investigadores mencionado arriba quienes basándose en la física cuántica crearon el rotaxano. En síntesis, se puede decir que los pulsos emitidos por unos imanes actúan sobre las partículas de hidrógeno presentes en el rotaxano, haciéndolas girar e interactuar con los átomos de carbono. Estos se orientan en ese campo de fuerza “subiendo” o “bajando”, lo que representa un 1 ó un 0, comportándose así como un transistor electrónico.

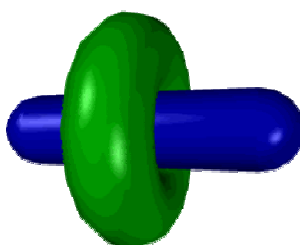
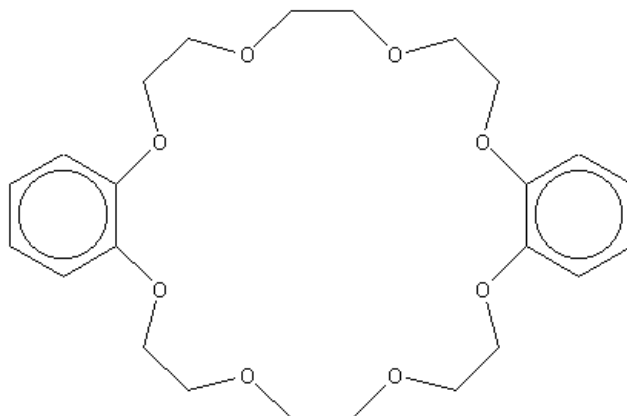


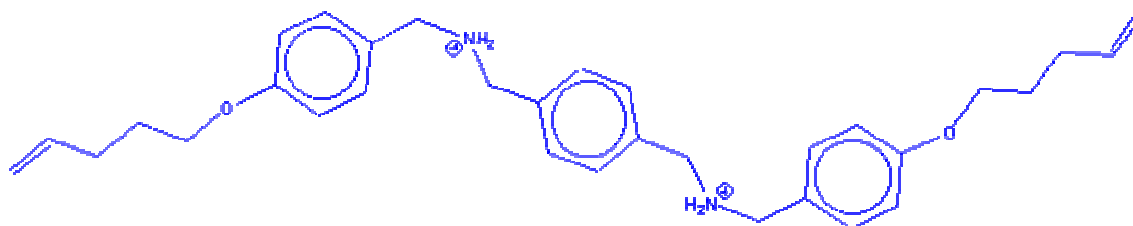
Figura 5. Representación de un pseudo-rotaxano

Después de “enhebrar” el largo eje-cadena a través de la corona del anillo, los dos extremos de la cadena podrían entonces ser unidos para formar el catenano.

La estructura de la corona se muestra en el dibujo siguiente:

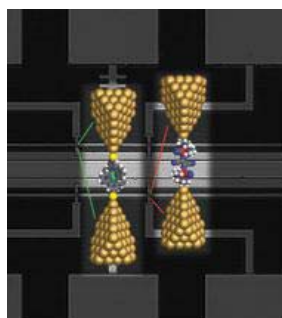


La estructura de la cadena larga es la que sigue a continuación:

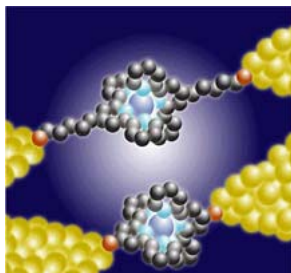


En los ordenadores "clásicos", el material es un semiconductor como el silicio del cual aprovechamos sus propiedades eléctricas; en los ordenadores cuánticos se trata de *átomos de flúor o iones de calcio*, y nos aprovechamos de sus propiedades cuánticas. La multinacional informática IBM ha desarrollado uno de cinco átomos de flúor. "La computación cuántica comienza cuando la ley de Moore llega a su límite. De acuerdo con dicha ley, está previsto que los circuitos continúen una miniaturización progresiva hasta el año 2020, cuando alcanzarán el tamaño de los átomos y las moléculas", explica Isaac L. Chuang, director del equipo de investigadores de IBM y de las universidades de Stanford y Calgary que han trabajado en el proyecto. "De hecho, los elementos básicos de las computadoras cuánticas son los átomos y las moléculas". Recientemente, científicos de las Universidades de Harvard y Cornell presentaron, de forma independiente, transistores electrónicos constituidos por dispositivos formados por una sola molécula compuesta por átomos de cobalto y vanadio, con los que se demostró la capacidad para controlar el flujo de electrones.

El siguiente dibujo (ar.geocities.com/moni2201/nanotrnl.htm) es una representación de un complejo cobalto-terpiridinil (cobalt-terpyridinyl) (a la izquierda) y de una molécula divanadio (a la derecha) unidas ambas a electrodos de oro. Sistema de un solo átomo del cobalto en un caso y dos átomos del vanadio en el otro.



Toda una hazaña increíblemente difícil de realizar, construir estos circuitos requirió la fabricación de "moléculas diseñadas" integradas por varios átomos dispuestos a modo de andamio en donde los átomos de cobalto o de vanadio se ubican en forma central.



(ar.geocities.com/moni2201/nanotr1.htm)

Dos moléculas usadas por los científicos de la universidad de Cornell, para crear un transistor de un sólo átomo. En cada molécula hay un átomo de cobalto (azul oscuro), retenido por una molécula de piridina (Pyridine, C_5H_5N) y además hay átomos de azufre(rojo), usados para fijar la molécula a los electrodos de oro. El flujo de electrones de un electrodo al otro se realiza por un salto en el átomo de cobalto.

La *simultaneidad de estados* según la física cuántica, consiste en que *los electrones pueden estar a la vez en dos posiciones* (el 0 y el 1). Esta particularidad da lugar a elementos (uno por cada átomo) que no se llaman bits, sino *qubits* (del inglés “quantum bit”). Además, los electrones no tienen por qué estar sólo en 1 y 0, sino que *pueden tomar valores intermedios*. Esta extraordinaria cualidad abre las puertas al almacenamiento masivo y simultáneo de datos.

El *entrelazamiento*, como sostiene el fisico español José Ignacio Cirac (ver Muy Interesante del mes de noviembre 2003), consiste en que si un cuanto de energía, por ejemplo un fotón, cambia de estado, esta variación se refleja inmediatamente en otro, aunque esté separado físicamente de él: es la transmisión más rápida posible. www.inicia.es/de/santiagoherrero/Tecnologia.htm.

La capacidad de memoria y la velocidad se potenciarán cuando la simultaneidad de estados y el entrelazamiento se dominen. Así, por ejemplo, los grandes sistemas de *cifrado y descifrado de mensajes*, basados en operaciones matemáticas sencillas pero muy largas y repetitivas, se verán acortados radicalmente en el tiempo. El microprocesador cuántico reduciría los pasos en el tratamiento de la información, aunque todavía es pronto para cotejar datos tangibles.

Organizar a los átomos entre sí y con su entorno sin errores ni interferencias se intuye que es empresa más que difícil. El ordenador ultrarrápido desarrollado por IBM ha realizado una operación de calculo avanzado a una velocidad exponencialmente superior a la de un ordenador convencional. En www.ibm.com/es/press/notas/2000/agosto/ordenadorcuantico.html se describe el concepto: “Utilizando la molécula de *cinco qubits*, el equipo de Isaac L. Chuang resolvió de un solo paso un problema matemático que precisa varios ciclos con ordenadores convencionales. El problema, denominado "order-finding" (encontrar el orden), consiste en determinar el periodo de una función particular, lo que constituye el centro de muchos otros problemas matemáticos que se utilizan en aplicaciones importantes tales como la *criptografía*.”

El problema de *encontrar el orden* puede ser descrito de la siguiente forma: se considera un número elevado de habitaciones y un número igual de pasillos entre ellas en los que se puede circular en un solo sentido; algunos de estos pasillos pueden ser circulares y acabar en la misma habitación de la que salen. Una persona que se moviese por este "laberinto" acabaría tarde o temprano por volver a la habitación de origen. El problema es calcular, *con un número bajo de consultas*, el número mínimo de pasillos por los que tiene que circular esta persona antes de volver a la habitación inicial. El ordenador cuántico de *cinco qubits* resuelve cualquier caso de este problema en una sola fase, mientras que con la informática convencional puede ser necesario realizar hasta cuatro pasos.”

Pero todavía falta mucho para que se puedan comercializar ordenadores cuánticos. Se calcula que se necesitan 1.000 partículas para realizar cálculos un poco complejos, y que es necesario coordinar unas 100.000 para obtener ordenadores moleculares de cierta capacidad. Algo que José Ignacio Cirac cree que no ocurrirá "en los próximos 20 años".

De las computadoras cuánticas se espera que desplacen a la tecnología del silicio, gracias a su velocidad y a su "nanoscópico" tamaño: los expertos consideran que en el volumen que ocupa un grano de arena se podrá albergar un ordenador cuántico cuya capacidad y velocidad equivaldrá a la de 1.000 procesadores como los actuales.

"Un ordenador molecular nos permitirá hacer cosas que todavía no podemos imaginar", dijo James Heath, que ha dirigido las investigaciones de UCLA, en un comunicado oficial. Según noticia diario El País ISABEL PIQUER [19/08/00]. "Será un millón de veces más eficaz que un ordenador basado en chips de silicio". También más económico y fiable. Los *qubits* no pueden ser clonados o copiados, haciendo prácticamente imposible el hecho de que alguien vulnere un código encriptado con un sistema cuántico.

"Con las moléculas estamos empezando a trabajar a la menor escala posible", dijo Fraser Stoddart, el químico que ha diseñado los interruptores junto con un equipo de investigadores de Hewlett-Packard. El hallazgo abre la puerta hacia un nuevo mundo de circuitos de apenas unos átomos de ancho, una miniaturización que promete cambiar la industria informática tal y como la conocemos. La investigación de Stoddart está en parte financiada por la Agencia de Proyectos de Defensa del Gobierno estadounidense.

Así pues, los dispositivos de memoria molecular podrían ofrecer una capacidad de almacenamiento muy superior a la de los ordenadores actuales y a mucho menor coste. Los actuales dispositivos microeléctricos de silicio tienen un tamaño mínimo de 180 nanómetros, más o menos una milésima del grosor de un cabello. Pero en la electrónica molecular los componentes más pequeños pueden llegar a reducirse a un solo nanómetro, lo que permitiría tener más de mil procesadores en el espacio que ahora ocupa uno solo de los actuales.

El sistema desarrollado en UCLA es relativamente simple, a partir de un catenano: "Imagine dos anillos interconectados, cada uno formado por dos estructuras que interactúan con estímulos electroquímicos", explica Stoddart. Un impulso eléctrico creará un movimiento de los anillos al alterar el orden de los electrones, "encendiendo" así el interruptor al provocar que las dos moléculas se toquen, permitiendo el paso de corriente. Otro impulso restablecerá el orden como si lo "apagara". Anteriormente este mismo equipo logró crear un sistema, basado en el rotaxano, pero que sólo podía funcionar una vez, y se inutilizaba después de un solo uso.

"Este nuevo sistema es muy robusto, se puede utilizar a temperatura ambiente", dice Stoddart. "Además se ve perfectamente cómo actúa el catenano, al principio es verde y luego cambia a marrón". Anteriormente el interruptor sólo funcionaba en una solución líquida, lo que no se podía utilizar para los ordenadores, pero el equipo de UCLA consiguió fijar las moléculas en una película sólida.

Sin embargo, todavía queda mucho camino hasta llegar a *ensamblar* un microordenador con estas moléculas. Los científicos de Hewlett Packard ya pueden fabricar cables conductores de un ancho inferior al tamaño de una docena de átomos, pero todavía no han encontrado la fórmula para conectar los interruptores moleculares entre sí.