

El mundo a ESCALA atómica

Marcos Manuel
Sánchez

Se ha escrito mucho en los últimos años sobre los denominados nanocompuestos, y es que hay que reconocer que ese término engloba a una enorme variedad de sustancias con un futuro prometedor en aplicaciones diversas y sorprendentes.

El orden de magnitud de los nuevos materiales moleculares es de millonésimas de milímetro, lo que ha dado origen a palabras como nanociencia y nanotecnología. Para darnos una idea de la relación de escala consideremos que una hormiga mide alrededor de un centímetro (1×10^{-2} metros), una célula, 20 micrómetros (20×10^{-6} metros), y un organelo del interior de la célula, como el ribosoma, 25 nanómetros (25×10^{-9} metros). Para apreciar lo diminuto que es un átomo debemos pensar que equivale a un 1/10 000 del tamaño de una bacteria, que a su vez es un 1/10 000 más pequeña que un mosquito. Baste añadir que en un nanómetro cúbico caben 258 átomos de carbono.

En la actualidad 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, óptimas para su utilización como dispositivos químicos nanoscópicos. Éstos tienen aplicación en la electrónica molecular, o en biomedicina, como máquinas a escala atómica con funciones de limpieza de arte-

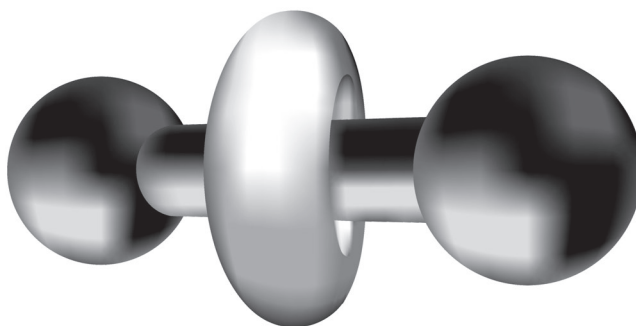


FIGURA 1. Representación generada por computadora de un rotaxano, un anillo (macrociclo) cerrado en torno a un eje. (Del documento HTML adaptado por el autor Matthew Carroll de su informe 'Towards the synthesis of a [2]catenane' sobre un trabajo de investigación realizado en la Birmingham University (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. Debe destacarse que no hay interacciones químicas entre el eje y el anillo.

rias dañadas por la aterosclerosis, reparadoras de ADN, reconstructoras de células o "vasculocitos" para la prevención de ataques cardíacos por obstrucción de las arterias, entre otros usos. Hablamos de moléculas "engranadas" mecánicamente con las cuales se han diseñado los motores moleculares, los interruptores nanoscópicos o los 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 y atravesados por un "hilo" en línea recta y que se pueden "ensamblar" entre sí.

Según David A. Leigh y Aden Murp,¹ de la Universidad de Warwick, Coventry, el bloque de componentes engarzados puede manifestar un comportamiento distinto al de los componentes individuales. Incluso puede tener propiedades totalmente nuevas. Los macrociclos protegen al hilo molecular central como una funda que los preserva de los agentes externos. Así, afirman los mismos autores, se consiguen 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 factible recuperar el macrociclo y aislarlo. Esto permitiría la generación de moléculas "con memoria de forma" que, según el ambiente que las rodease, adoptarían una configuración u otra, es decir, "recordarían" la forma preferida. Lo anterior abre la puerta al desarrollo de los interruptores moleculares.

Si se cambian las interacciones entre el hilo y los anillos que lo rodean pueden variarse selectivamente las propiedades moleculares. Si lo que se modifica es "la cara" que presentan al ambiente externo, mediante un estímulo adecuado es posible obtener moléculas "inteligentes", como las "lanzaderas" moleculares: estos rotaxanos poseen dos estaciones o sitios de reconocimiento en el hilo entre los cuales el macrociclo es libre de desplazarse. Al manipular su afinidad por cada sitio, los químicos pueden ejercer un alto grado de control sobre este movimiento submolecular.

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

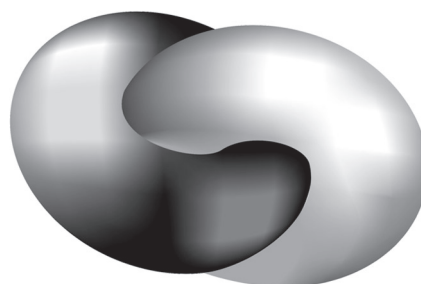


FIGURA 2. Representación generada por computadora de un catenano (dos o más anillos químicos entrelazados). El catenano se mantiene íntegro porque los dos anillos están entrelazados, como los eslabones de una cadena, y al igual que éstos, no pueden ser separados sin romper al menos uno de ellos. Esto añade un grado de libertad rotacional no asequible a otros sistemas, lo que puede aplicarse en el desarrollo de nanodispositivos, como los nuevos sistemas de almacenamiento de información, las computadoras moleculares.



NANOCOMPUTADORAS ELECTRÓNICAS QUÍMICAMENTE ENSAMBLADAS (CAEN)

Científicos de los laboratorios de Hewlett-Packard en Palo Alto, California, y de la Universidad de California en Los Ángeles (UCLA) están desarrollando computadoras sumamente 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 investigadores 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” se aplica un campo eléctrico entre los cables, entonces el electrón ya no puede brincar tan fácilmente porque el puente ya no está allí.

Los científicos también están tratando de crear cables más pequeños para usarlos 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, y que 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 compañía 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 llamadas “nanocomputadoras electrónicas químicamente ensambladas”, cuyas siglas en inglés son CAEN (*chemically assembled electronic nanocomputers*).² Las nuevas computadoras serán mucho más pequeñas y un billón de veces más rápidas que las que usamos en la actualidad. También serán más económicas. Se cree que se requerirán dos años más para fabricar la primera CAEN. Y pocos años después podrían estar ya a la venta al público.

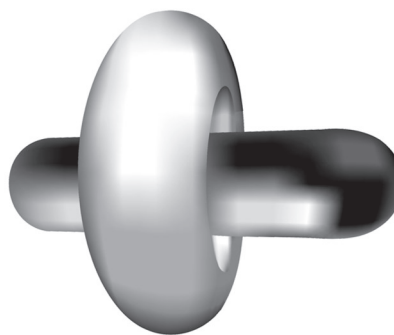


FIGURA 3. Representación de un pseudo-rotaxano. Después de “enhebrar” el largo eje-cadena a través de la corona del anillo, los dos extremos de la cadena podrían entonces ser unidos para formar el catenano.

Uno de los grandes retos a resolver 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, que puede ser leída, pero no modificada. La molécula de rotaxano no puede emplearse para almacenar datos en la memoria de la computadora que se cambia una y otra vez, es decir, la memoria de acceso aleatorio o memoria RAM (*random access memory*) usada por los procesadores de texto. Los científicos están tratando de desarrollar una molécula que pueda utilizarse cuantas veces sea necesario.

Estas computadoras microscópicas incorporadas al torrente sanguíneo de una persona, podrían identificar microorganismos cuyo tamaño podría no ser mayor al de ellas; así se conocerían los fármacos específicos requeridos para combatir tales infecciones. Ésta es una entre miles de posibilidades de aplicación de estos dispositivos. Phil Kuekes, arquitecto de computadoras en Hewlett-Packard e investigador de CAEN afirma que “eventualmente, 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 Ley de Moore, aceptada universalmente durante las últimas tres décadas, la cual vaticina que: “El número de transistores que caben en un chip de silicón se duplica cada 18 meses”. Dicha ley se ajusta de vez en cuando. El coeficiente multiplica-

dor 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 se reducirá a 1.16 desde esta última fecha en adelante, hasta alcanzar los límites de la física. La primera necesidad que impulsó a la miniaturización de los circuitos electrónicos surgió de los programas de los cohetes balísticos,³ debido a su limitada capacidad de carga. La microtecnología se desarrolló paulatinamente y se aplicó de forma inmediata a las computadoras comerciales, lo que redujo enormemente el tamaño de sus procesadores. Moore acertó plenamente. Los pasos agigantados en la evolución de la informática han supuesto un considerable avance en la tecnología aplicada a los aparatos electrónicos. En la década de los setenta, los primeros chips contenían unos 2300 circuitos. Actualmente, un Pentium 4 posee más de cuarenta y dos millones.⁴ Pero al cabo de esos treinta años, la microinformática parece haber tocado fondo.⁵

Es probable que en breve tiempo se fabriquen chips de cincuenta átomos de ancho, si bien las leyes de la física impiden que el método tradicional de la impresión por luz del transistor pueda llegar a operar a una escala menor. La razón: las computadoras sólo entienden la lógica binaria, es decir, los valores 0 o 1, llamados bits, que no representan 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 configurar los lenguajes de programación. Los programadores utilizan estos lenguajes para crear los programas con los que dan instrucciones a la computadora. A continuación, dichos programas se traducen al lenguaje binario o código máquina, que es el único que entiende la computadora. Desde un punto de vista físico, el valor 0 o 1 de un bit se procesa en la computadora 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). La idea clave de los chips es que estos transistores se almacenan en circuitos integrados (integran en la misma pieza del semiconductor todos los componentes de un circuito eléctrico: transistores, diodos, resistencias, condensadores, etc.), los cuales están hechos enteramente de silicio. Hay cien millones de transistores por chip. Para crearlos, un rayo de luz graba las obleas de silicio,⁶ 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

© Sergio Javier González Carlos, de la serie *Borrados*, 2003.





© Sergio Javier González Carlos, de la serie *Borrados*, 2003.



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 usado.

A pesar de lo anterior, en 1999, el ya mencionado grupo de investigadores de la Universidad de California, en Los Ángeles, creó el rotaxano basándose en la física cuántica. 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. Éstos se orientan en ese campo de fuerza “subiendo” o “bajando”, lo que representa un 1 o un 0, comportándose así como un transistor electrónico. En las computadoras “clásicas”, el material empleado es un semiconductor como el silicio del cual aprovechamos sus cualidades eléctricas; en las computadoras cuánticas se trata de átomos de flúor o iones de calcio, y utilizamos sus propiedades cuánticas. La multinacional informática IBM ha desarrollado un circuito con 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. Recientemente, los científicos de las Universidades de Harvard y Cornell presentaron, de modo 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. Construir estos circuitos requirió la fabricación de “moléculas diseñadas” integradas por varios átomos dispuestos como andamio en donde los átomos de cobalto o de vanadio se ubican en la parte central.⁷

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 físico español José Ignacio Cirac,⁸ estriba 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. Por consecuencia, la capacidad de memoria y la velocidad se potenciarán cuando la simultaneidad de estados y el entrelazamiento se dominen. Así, por ejemplo, el tiempo que requieren los grandes sistemas de cifrado y descifrado de mensajes, basados en operaciones matemáticas sencillas, pero muy largas y repetitivas, se acortará radicalmente. El microprocesador cuántico reduciría los pasos en el tratamiento de la información, aunque todavía es pronto para cotejar datos tangibles.



© Sergio Javier González Carlos, de la serie *Borrados*, 2003.

Por otra parte, el organizar a los átomos entre sí y con su entorno sin errores ni interferencias se intuye que es una empresa más que difícil. La computadora ultrarrápida desarrollada por IBM ha realizado una operación de cálculo avanzado a una velocidad exponencialmente superior a la de una computadora convencional. Al usar la molécula de cinco qubits, el equipo de Isaac L. Chuang⁹ resolvió de un solo paso un problema matemático que precisa varios ciclos si se emplean computadoras tradicionales. 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.

Pero todavía falta mucho para que se puedan comercializar las computadoras cuánticas. Se calcula que se necesitan unas 1000 partículas para realizar cálculos poco complejos, y que se deben coordinar unas 100 000 para obtener computadoras moleculares de cierta capacidad. Algo que José Ignacio Cirac cree que no ocurrirá en los próximos veinte años.⁸

Se espera que las computadoras cuánticas 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 1000 procesadores como

los actuales. Según James Heath, quien ha dirigido las investigaciones de la UCLA:

Una computadora molecular nos permitirá hacer cosas que todavía no podemos imaginar, será un millón de veces más eficaz que una computadora basada en chips de silicio. También más económica 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.

Al respecto, Fraser Stoddart, el químico que ha diseñado los interruptores junto con un equipo de investigadores de Hewlett-Packard, expresó: “Con las moléculas estamos empezando a trabajar a la menor escala posible”. 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. El sistema desarrollado en la UCLA, a partir de un catenano, es relativamente simple: “Imagine dos anillos interconectados, cada uno formado por dos estructuras que interactúan con estímulos electroquímicos”, explica Stoddart. Un impulso eléctrico propiciará el movimiento de los anillos al alterar el orden de los electrones, “encendiendo” así el interruptor y provocará 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 luego.

De acuerdo con Stoddart, “este nuevo sistema es muy robusto, se puede utilizar a temperatura ambiente”. “Además se ve perfectamente cómo actúa el cate-nano, al principio es verde y luego cambia a marrón”. Anteriormente, el interruptor sólo funcionaba en una solución líquida que no se podía utilizar para las computadoras, pero el equipo de la UCLA consiguió fijar las moléculas en una película sólida. Sin embargo, todavía queda mucho camino hasta llegar a ensamblar una microcomputadora con estas moléculas. Los científicos de Hewlett-Packard ya pueden fabricar cables conductores de un espesor inferior al tamaño de una docena de átomos, pero todavía no han encontrado la fórmula para conectar los interruptores moleculares entre sí.

Un ámbito circunscrito a una escala de unidades mil veces inferior a la millonésima parte de un milímetro constituye un mundo nuevo para nosotros los, comparativamente, gigantes, los que respiramos la atmósfera de lo macroscópico: los humanos. La nanotecnología amplía las fronteras del conocimiento hacia vertientes que ofrecen un alto potencial para mejorar la calidad de vida del hombre. No obstante, como todas las tecnologías de vanguardia puede resultar ser una caja de Pandora, la cual, ahora que está ya abierta, esperamos que se utilice para mejorar el futuro de la humanidad.

REFERENCIAS

¹ Molecular tailoring: the made-to-measure properties of rotaxane. Publicado en *Chemistry & Industry*, el 1 de marzo de 1999.

² www.harcourtschool.com/newsbreak/invisible_spn.html. Harcourt School publishers.

³ lectura.ilce.edu.mx:3000/sites/ciencia/volumen3/ciencia3/112/htm/sec_31.htm. *Electromagnetismo: de la ciencia a la tecnología*. Autor: Eliezer Braun.

⁴ mssimplex.com/microprocesador.htm. Página: Microsistemas. Información actualizada sobre computación e internet el 22 de noviembre de 2002.

⁵ www.toptutoriales.com/tecno/articulos/articulo1.htm. Chips moleculares, el reino de Lilliput. Autor: J. Antonio Pascual Estapé. (Extraído de *PCMania online*).

⁶ ispjae.edu.cu/gicer/Boletines/4/137/bol137.htm. *Boletín de redes* 137.

⁷ ar.geocities.com/moni2201/nanotr1.htm.

⁸ www.inicia.es/de/santiagoherrero/Tecnologia.htm. (Ver *Muy* del mes de noviembre).

⁹ En www.ibm.com/es/press/notas/2000/agosto/ordenadorcuantico.html se describe el concepto.

Marcos Manuel Sánchez, Colegio Oficial de Químicos de Madrid. faboroco@wanadoo.es

