

CONCLUSIONES

Al día de hoy ya nadie duda que el futuro de la supercomputación se llama Beowulf. Ese futuro ya está aquí. Gracias a Beowulf, científicos e ingenieros que antes debían comprar horas de supercomputador a las grandes instituciones ahora pueden disponer de su propio sistema a un precio razonable. Alguien ha comparado esta revolución a la de los años 70, cuando *Apple* puso los computadores al alcance de todo el mundo a un bajo costo.

De todas formas, montar un sistema con unas cuantas docenas de PC's sigue costando unos cuantos millones de pesetas. Si todavía le resulta excesivamente caro al lector, no todo está perdido. Su nombre: *Brainwulf*... (Figura 6).

REFERENCIAS

- [1] <http://www.lone-star.net/literature/beowulf/index.html>
- [2] <http://legends.dm.net/beowulf/index.html>
- [3] <http://www.linux.org/>
- [4] <http://mission.base.com/tamiko/cm/cm-text.htm>
- [5] <http://www.research.ibm.com/deepblue/home/html/b.html>
- [6] <http://www.beowulf.org/>
- [7] <http://www.hpcc.nasa.gov/insights/vol7/beowulf.htm>
- [8] <http://cnls.lanl.gov/avalon/>
- [9] <http://www.TopClusters.org/>
- [10] <http://www.top500.org/>
- [11] <http://www.cs.sandia.gov/cplant/>
- [12] <http://www.llnl.gov/asci/>
- [13] <http://cocoa.aero.psu.edu/>
- [14] <http://www.badcheese.com/~steve/clustertux.html>
- [15] <http://tonga.usip.edu/gmoyna/chaingang/index.html>
- [16] <http://www.cs.ucsb.edu/Facilities/Cluster/>
- [17] <http://www-fp.mcs.anl.gov/collage/>
- [18] <http://loki-www.lanl.gov/>
- [19] <http://www.d2.com>
- [20] <http://www2.linuxjournal.com/cgi-bin/frames.pl/ljissues/issue46/2494.html>

Ángel Pérez de Madrid
Pablo Sebastián Dormido Canto
Dpto. de Informática y Automática

Catenanos y rotaxanos. Máquinas en miniatura

La construcción de máquinas en miniatura o nanoescala es un objetivo de la Ciencia y Tecnología modernas, inspirado en el artículo de Richard Feynman (galardonado con el Premio Nobel de Física) "There's plenty of room at the bottom" [1] en el que propuso por primera vez la idea de una química basada en la construcción de máquinas miniaturizadas semejantes a las máquinas mecánicas y construidas átomo por átomo a escala molecular, y esta idea se ha hecho realidad. La elaboración de estas máquinas abre nuevos caminos a la investigación, ya que, como sus parientes de la biología, las enzimas, las máquinas moleculares están principalmente dirigidas hacia la transformación de una energía aportada del exterior para poder ser utilizada posteriormente.

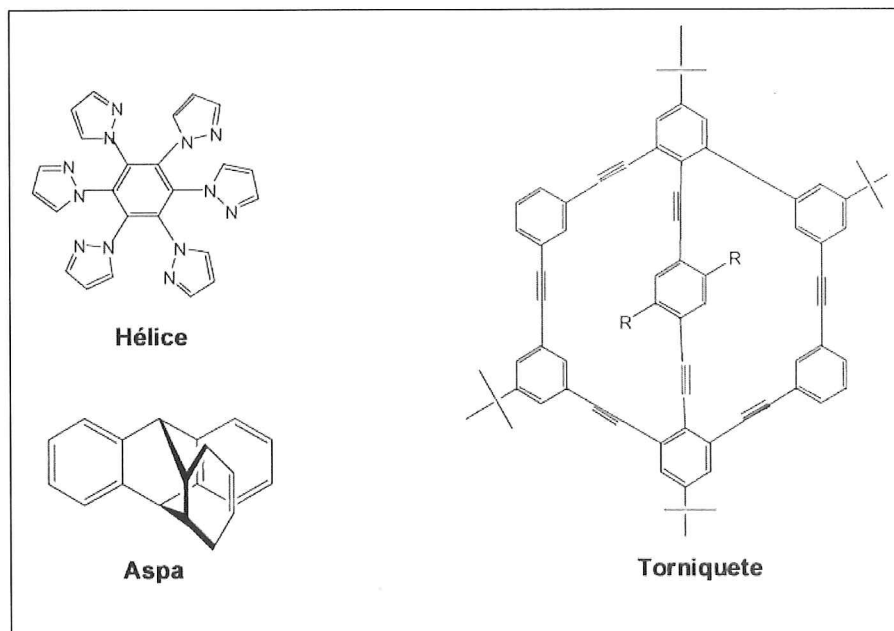
La miniaturización de un dispositivo a nivel molecular no tiene únicamente valor académico sino que también está contribuyendo al desarrollo de la nanotecnología [2] (una molécula mide menos de un nanómetro, una millonésima de milímetro). Los progresos en la construcción de dispositivos moleculares a escala nanométrica, pueden tener importancia en muchos campos como, por ejemplo, en

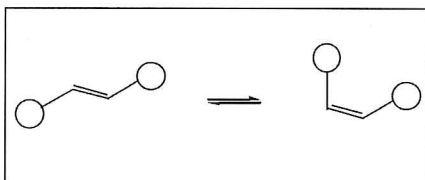
ingeniería biomimética o tecnología de computadores.

A lo largo de las últimas décadas se han construido diversos tipos de moléculas semejantes a hélices, aspás, ruedas dentadas, engranajes, frenos, torniquetes, péndulos, balancines, giroscopios, y un largo etcétera, de los que se muestran más abajo algunos ejemplos [3].

Mientras los físicos e ingenieros exploran la ingeniería en nanoescala, los químicos utilizan la síntesis química para ensamblar compuestos por fuerzas intermoleculares preprogramadas. Uno de los retos más interesantes en este área es el de diseñar y sintetizar moléculas que puedan experimentar cambios en su forma, o en la posición de sus componentes, en respuesta a estímulos externos y, en principio, realizar un trabajo mecánico. La mayor parte de esta investigación se ha centrado en la clásica isomería *cis-trans* hasta llegar a los **catenanos** y **rotaxanos** [4].

Casi ha transcurrido un siglo desde que el visionario Willstätter especulara sobre una molécula con dos anillos entrelazados al igual que los eslabones de una cadena. Después de muchos intentos en 1960 Wasserman [5], sintetizó el primer **catenano**, que es así como se deno-

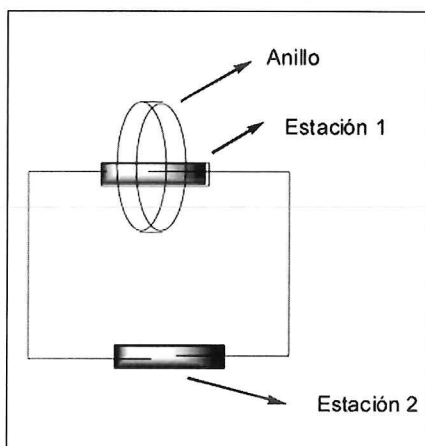




Isomería cis-trans.

minan estas moléculas unidas entre sí sin interacciones propiamente químicas.

Los catenanos son verdaderas máquinas moleculares o motores moleculares y se les denomina máquinas mecánicas moleculares o motores moleculares, presentando unas propiedades fotofísicas y elec-

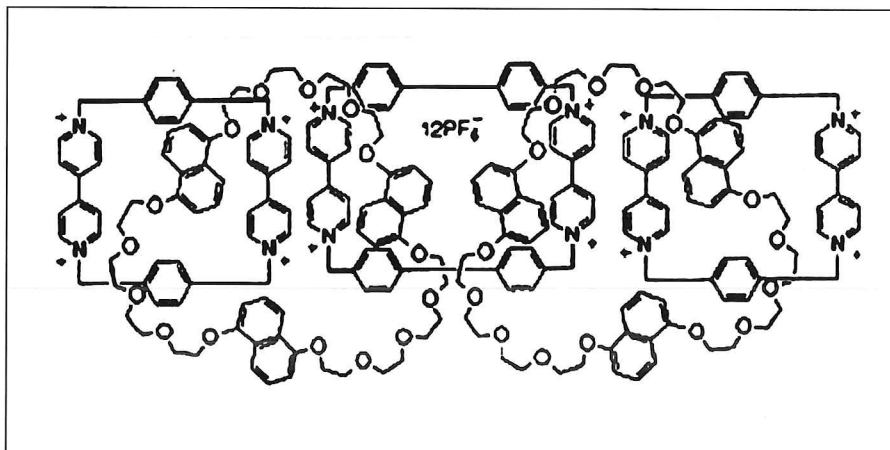


Catenano: Un anillo aprisionado en otro anillo moviéndose entre dos estaciones.

trónicas muy interesantes, y en el futuro proveerán los elementos básicos para construir máquinas y motores en nanoescala. Hoy en día, este tipo de química arquitectónica se ha multiplicado dando lugar a un gran número de nuevas estructuras como el **olimpiadano** que presenta cinco anillos entrelazados como el logotipo de los juegos olímpicos.

Los **rotaxanos** (del latín *rota* = rueda y *axis* = eje) están compuestos por uno o más macrociclos rodeando a una cadena molecular que porta en los extremos dos grupos bloqueantes, como un eje con las ruedas de un carro, y ambos se mantienen unidos por enlaces no covalentes. El macrociclo puede cambiar de posición moviéndose a lo largo de la cadena.

Uno de los hechos más peculiares de la arquitectura de los rotaxanos es que sus componentes entrelazados



Olimpiadano.

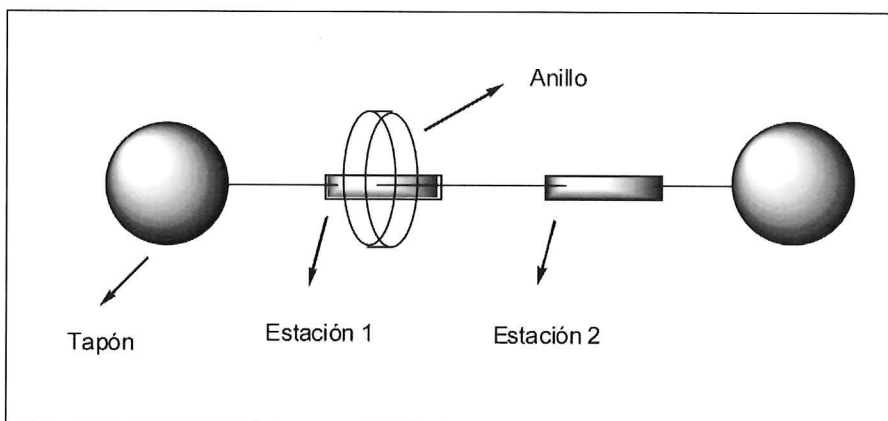
pueden moverse, en principio, sin romper enlaces covalentes. Tales procesos dinámicos son muy atractivos para los químicos, físicos y científicos de materiales porque combinan la posibilidad de posicionar componentes individuales con la de cambiar su separación relativa y orientación, haciendo ello posible a través de la influencia de un estímulo externo.

El desarrollo de la química supramolecular [6] y de la nanotecnología ha contribuido a la síntesis de dispositivos moleculares o de microconmutadores implicados en la ingeniería molecular. Los rotaxanos y los catenanos ocupan un sitio primordial en estas disciplinas, pues son entidades moleculares muy bien definidas estructuralmente y las funciones que portan pueden ser excitadas por el impulso de una señal exterior. La energía empleada en estos sistemas es muy variada; un rayo luminoso, un impulso químico o

electroquímico puede arrancar o provocar un movimiento mecánico abriendo así la vía para transmitir una información a nivel molecular.

Estos sistemas, catenanos y rotaxanos, en los que el movimiento es dirigido por fuerzas químicas, electroquímicas o fotoeléctricas, se describen mejor como interruptores moleculares o lanzaderas, y tienen gran potencial en, por ejemplo, el procesado de información a escala molecular.

Una de las posibles aplicaciones de los rotaxanos es la de sustituir a los chips actuales de los ordenadores [7]. El soporte binario de todos los ordenadores se fabrica grabando una placa de silicio mediante rayos de luz. La reducción del tamaño de estos componentes requiere en la actualidad afinar extraordinariamente la precisión del equipo de grabado. Los componentes electrónicos de los ordenadores han experimentado una continua reducción



Rotaxano: Anillo aprisionado en una cuerda moviéndose entre dos estaciones.

de tamaño a lo largo de los años, pero a medida que la miniaturización se acerca a su límite teórico, resulta patente que los errores son cada vez más fáciles de cometer. Un solo fallo en un transistor entre los millones que componen un chip puede inutilizar un ordenador.

Con la nueva técnica, los circuitos podrían construirse usando procesos químicos en lugar de rayos luminosos. En cierto sentido, el tamaño de las herramientas de grabado se habría reducido a dimensiones químicas, es decir, a la magnitud de una sola molécula, al igual que el interruptor en sí mismo. Esta tecnología ha sido bautizada con el nombre de **electrónica molecular** o **molectrónica** y promete una enorme capacidad de almacenado de información. Un chip del tamaño de un grano de arena tendrá la capacidad de cien ordenadores personales actuales. La nueva tecnología abre la vía a la más extrema de las miniaturizaciones concebibles, y mediante un proceso químico en el que la precisión no es un factor limitante.

Durante los últimos 15 años se han desarrollado varios métodos eficaces de síntesis de catenanos y rotaxanos, donde las interacciones supramoleculares se utilizan para la preorganización de los componentes reactivos. Hoy en día se pueden sintetizar en un solo paso [8], catenanos y rotaxanos con altos rendimientos a partir de productos de partida comerciales y baratos. Se utilizan compuestos orgánicos específicos que dirigen la síntesis [9]. La eficacia de estos compuestos es la de regular interacciones de enlaces no covalentes, como enlaces de hidrógeno, empaquetamiento π - π , y/o las

interacciones hidrofóbicas. La formación de enlaces covalentes va acompañada de la generación de un enlace mecánico, el cual mantiene los componentes del catenano o rotaxano juntos.

Las interacciones de los enlaces no covalentes en las moléculas restringen los movimientos relativos de los componentes, dando lugar a isómeros translacionales cuando la constitución de la molécula lo permite. Estos hechos ofrecen la oportunidad de introducir en estos sistemas propiedades de máquinas de ingeniería y se han identificado en solución un número de procesos dinámicos diferentes en catenanos y rotaxanos. Además, la incorporación de grupos funcionales apropiados o centros redox activos en uno o más de los componentes que se mueven ha aumentado las propiedades químicas, electroquímicas y/o el control fotoquímico de estos procesos dinámicos.

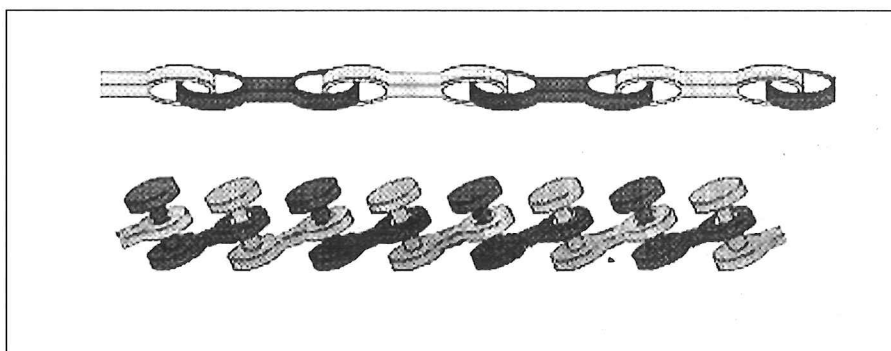
Considerando la estructura entrelazada de los catenanos y rotaxanos como nuevos enlaces, uno de los retos siguientes es introducirlos en la cadena principal de un polímero. Las estructuras de los polímeros pueden ser obtenidas por policondensación de catenanos y rotaxanos bifuncionales. Puesto que existen enlaces no covalentes, esta clase de polímeros son muy atractivos desde el punto de vista de sus propiedades reológicas y mecánicas. Los poli[2]-catenanos y poli[2]-rotaxanos han sido ya sintetizados [10].

Como se puede apreciar la historia de las máquinas moleculares está justo en su comienzo, ya que a las máquinas moleculares no se les puede dar una definición clara que

indique para qué sirven o para qué pueden servir. Para desarrollarse como un campo aparte de la química será necesario dar nacimiento a un alfabeto de máquinas moleculares simples definiendo el trabajo de cada una y cuantificando la información transmitida por la máquina, ya que hoy por hoy las máquinas moleculares no son capaces de continuar unidireccionalmente como cabría esperar de un motor molecular. El trabajo último será el de asociar diferentes máquinas moleculares de manera que puedan transmitirse fuerzas y energías de unas a otras para proveer al hombre de nuevos dispositivos útiles.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] R. P. Feynman, *Eng. and Sci.* **23**, 22 (1960); *Science* **254**, 1300 (1991).
- [2] K. E. Drexler, *Engines of creation: the coming era of nanotechnology*, New York, Anchor Press/Double Day, 1986; K.E. Drexler, *Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing and Computation*, John Wiley & Sons, New York, 1992.
- [3] Z. Asfari y J. Vicens. *L'actualité chimique* **3**, 5 (2000).
- [4] J. P. Sauvage y C. Dietrich-Buchecker. *Molecular Catenanes, Rotaxanes and Knots*. Ed. Wiley-VCH, 1999.
- [5] E. Wasserman, *J. Am. Chem. Soc.* **82**, 4433 (1960).
- [6] J. M. Lehn. *Supramolecular Chemistry*. Ed. VCH. Weinheim, 1996.
- [7] P. Davis. *Nature* **401**, 120 (1999).
- [8] O. Safarowsky, M. Nieger, R. Fröhlich y F. Vögtle. *Angew. Chem. Int. Ed.* **39**, N° 9, 1616-1618 (2000).
- [9] Seel y F. Vögtle, *Chem. Eur. J.* **6**, N° 1, 21-24 (2000).
- [10] Shimada, K. Ishikawa y N. Tamaki, *Acta Chem. Scandinavica* **52**, 374 (1998).



Poli[2]-catenano y poli[2]-rotaxano.