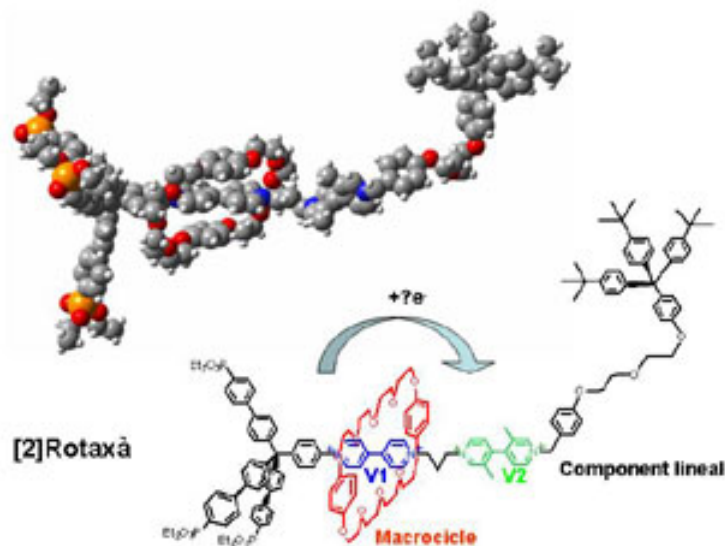


05/2008

Nanomoléculas "computerizadas"



Gran parte de los sistemas y materiales creados a partir de la nanotecnología están basados en moléculas. Un ejemplo de éstas son los [2]rotaxanos, cuyas propiedades físicas y químicas son potencialmente útiles en informática y medicina. Esta tesis desarrolla y emplea una potente estrategia computacional para modelar con gran eficiencia un [2]rotaxano desarrollado en el University College de Dublin, en Irlanda.

La nanotecnología – el estudio, diseño, síntesis, manipulación y aplicación de materiales y sistemas funcionales a nanoescalas (1-100 nm)- ha supuesto un gran avance en muchas industrias y la creación de nuevos materiales con propiedades extraordinarias y con múltiples aplicaciones, principalmente en informática y medicina.

Muchos de estos materiales y sistemas funcionales están basados en moléculas, como por ejemplo los [2]rotaxanos, que presentan unas propiedades físicas y químicas muy interesantes. Estas moléculas están formadas por una cadena lineal, envuelta por un macrociclo que contiene dos grupos muy voluminosos que evitan la salida del anillo. La molécula lineal puede tener una o más de una zona denominada estación, que puede interactuar con el macrociclo. Esta

interacción se puede alterar, mediante un estímulo externo (como por ejemplo oxidando o reduciendo las estaciones, modificando la temperatura o el pH) y como consecuencia, podemos hacer variar la posición del anillo en la cadena. Si se logra controlar el movimiento del macrociclo, es posible utilizar estas moléculas en la fabricación de dispositivos electrónicos y máquinas moleculares (transistores moleculares, puertas lógicas, dispositivos de memoria, circuitos, nanoválvulas, ascensores moleculares).

En esta tesis doctoral se ha desarrollado y empleado una potente estrategia computacional para el estudio de un [2]rotaxano que fue sintetizado y caracterizado experimentalmente por el grupo de Nanoquímica del University College de Dublin, en Irlanda. La reducción de este [2]rotaxano permite modular la posición del anillo (Fig. 1). En una primera aproximación, se estudiaron unos pseudorotaxanos –supramoléculas formadas por una cadena lineal sin grupos bloqueadores que se inserta en un macrociclo– formados por las mismas estaciones que presentaba el [2]rotaxano en cada etapa de la reducción (Fig. 2). Se modeló el comportamiento de los pseudorotaxanos en diferentes disolventes (CH_3CN i CH_3OH) y con la presencia de dos tipos de contraiones (PF_6^- i Br^-). Se quiso profundizar en el conocimiento de las interacciones entre el macrociclo y las estaciones y se observó que estas interacciones son cada vez menores a medida que vamos reduciendo las estaciones.

Los resultados obtenidos con los [2]pseudorotaxanos reproducen perfectamente el comportamiento del macrociclo en cada proceso de reducción del [2]rotaxano encontrado de manera experimental y permite hacer uso de la metodología utilizada a la hora de diseñar y estudiar el comportamiento de nuevos [2]rotaxanos.

Javier Pérez Mirón

Universitat Autònoma de Barcelona. Facultat de Ciències i Biociències.

Javier.perez@uab.cat

Referencias

"Molecular Modelling of Switchable [2]Rotaxanes". Tesis doctoral dirigida por Carlos Jaime Cardiel y presentada por Javier Pérez Mirón el 14 de marzo de 2008 en la Facultad de Ciencias y Biociencias.

[View low-bandwidth version](#)