

DISEÑO Y DESARROLLO DE SISTEMAS INSTRUMENTADOS POR  
INGENIERÍA EN NANOTECNOLOGÍA PARA LA AUTOMATIZACIÓN DE  
PLANTAS INDUSTRIALES

Liz Caterine Díaz Puentes

Monografía de compilación

Asesor

Dr. Antonio Faustino Muñoz Moner

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BUCARAMANGA  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
BUCARAMANGA.  
2017

## Tabla de contenido

RESUMEN .....	10
1. INTRODUCCIÓN .....	11
1.1. OBJETIVOS .....	13
1.1.1. Objetivo General.....	13
1.1.2. Objetivos Específicos .....	13
2. MARCO TEÓRICO.....	14
2.1 CONCEPTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA .....	14
2.2. HISTORIA DE LA NANOTECNOLOGIA.....	19
2.3. MÉTODOS DE NANO FABRICACIÓN .....	23
2.3.1. Diseño, desarrollo nanosensores por fabricación basados en la técnica del electrohilado para implementación en nanoinstrumentación .....	26
2.3.2. Modelación y simulación de sistemas nanotecnológicos dotados de nanoinstrumentación (nanosensores) asociados a la instrumentación biomédica.....	31
2.3.3.1. Creación de los cluster a través de unidades de extracción de características .....	34
2.3.5. Metodología basada Células madres .....	36
2.3.2. El electrospinning .....	42
2.3.3. Ecuaciones que rigen el comportamiento de los sistemas nanotecnológicos basados en la teoría cuántica.....	55
2.4. APLICACIONES DE NANOTECNOLOGÍA.....	69
2.4.1. Aplicaciones de nanotecnología en medicina.....	69
2.4.2. Aplicaciones de nanotecnología en medio ambiente.....	71
2.4.3. Aplicaciones de nanotecnología en Energía .....	72
2.4.4. Aplicaciones de nanotecnología en el empaçado de alimentos y monitoreo .....	74
2.4.5. Aplicaciones en Electrónica.....	75

3. METODOLOGÍA DE DISEÑO DE SISTEMAS A NANOESCALA .....	77
3.1. Aplicaciones de nanotecnología computacional en el diseño de sistemas a nanoescala.....	77
3.1.1. Nanotecnología computacional con aplicación dinámica molecular software Molecular Workbench .....	77
3.1.2. Nanotecnología computacional con aplicación dinámica molecular software Visual Molecular Dynamics VMD .....	104
3.1.3. Nanotecnología computacional software Rasmol2.....	105
4. TRABAJOS REALIZADOS POR OTROS USUARIOS EN DISEÑO, DESARROLLO Y APLICACIÓN DE NANOSENSORES .....	106
4.1. INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO DE NUEVA METODOLOGÍA DE DISEÑO BASADA EN PATRONES DE CÉLULAS MADRES, Y CONTROL MECATRÓNICO DE UNA PRÓTESIS BIOELÉCTRICA DE MIEMBRO INFERIOR PARA DISCAPACITADOS DE LA VIOLENCIA EN COLOMBIA, UTILIZANDO CLONACIÓN ARTIFICIAL.....	106
4.2. DISEÑO, DESARROLLO Y APLICACIÓN DE NANOSENSOR TERMORRESISTIVO PARA UN PROCESO DE NANOCATALISIS EN REACTORES QUÍMICOS DE LA INDUSTRIA DEL PETRÓLEO. (ECOPETROL)	119
4.3. DISEÑO DESARROLLO Y APLICACIÓN DE NANO SENSOR DE VELOCIDAD EN EJES HOMOCINÉTICOS PARA EL MONITOREO Y REGISTRO EN CAJA NEGRA PARA AUTOMOTORES. (TRANSEJES) .....	124
4.4. Diseño y desarrollo de sistemas de instrumentación inteligente para carreteras de la malla vial de Colombia (Corasfaltos) .....	128
CONCLUSIONES .....	141
BIBLIOGRAFÍA.....	142
ANEXOS .....	168

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Queso Mimolette, un ejemplo de las dimensiones o escala nanométrica .....	15
Figura 2. Las señales eléctricas resultantes o parámetro objeto de control (Temperatura, resistencia, fuerza, torque) se acondicionan, ya sea para seguir procesándose o para exhibirse adecuadamente para su interpretación o lectura .	17
Figura 3. Enfoques Top Down y Bottom up .....	23
Figura 4. Respuesta a dimensional de un instrumento de segundo orden .....	26
Figura 5. <i>El modelo del circuito equivalente a una isla metálica débilmente acoplado a dos electrodos metálicos en el cual es aplicado un voltaje.</i> .....	29
Figura 6. <i>Regimen de bloqueo de coulmb</i> .....	30
Figura 7. Delgado Alberto Rule Based System with DNA Chip.....	32
Figura 8. <i>Diagrama de la metodología aplicada</i> .....	33
Figura 9. <i>Unidades de extracción de características que generan funciones de pertenencia y las correspondientes caracterizaciones del espacio de entrada</i> .....	35
Figura 10. <i>Procedimiento de jerarquía del AGs</i> .....	36
Figura 11. <i>Procedimientos de Clonación</i> .....	37
Figura 12. Referentes de modelos basados en clusters difusos y la la energía de un sistema borroso .....	39
Figura 13. . Nanohilos cruzados con conexiones randómicas. ....	45
Figura 14. Un dispositivo AND aleatorio para paquetes con un ancho de 3 .....	46
Figura 15. Agrupación de plexores con $N=4$ y $s=3/4$ .....	47
Figura 16. Un ejemplo de la formulación de un diseño de circuito.....	49
Figura 17. Un circuito simple.....	49
Figura 18. Estados cuánticos.....	51
Figura 19. Representación de un qubit por medio de la esfera de bloch. ....	52
Figura 20. Representación de un qubit por dos niveles electrónicos en un átomo	53
Figura 21. Descripción esquemática de la estructura del CNT .....	56
Figura 22. Diferentes campos de aplicación de la nanotecnología .....	69

Figura 23. Metodología de diseño conceptual, modelación y simulación por nanofabricación Bottom Up (de abajo hacia arriba) .....	77
Figura 24 . Nanobud .....	79
Figura 25. Nanoauto .....	80
Figura 26. Un nanoauto hecho de futbolenos .....	81
Figura 27. Una Carrera de moléculas de agua a través de nanotubos de carbón .	82
Figura 28. Átomos de neón difuminándose en una junta de nanotubo cuádruple .	83
Figura 29. Moléculas de agua en un nanotubo .....	84
Figura 30. Colisión entre un átomo de xenón y un futboleno .....	85
Figura 31. Deposición atómica de capas: un experimento Virtual .....	86
Figura 32. Auto-ensamble.....	88
Figura 33. Una cuadrícula que se ensambla sola .....	89
Figura 34. Auto-ensamble electrostático: creando monocapas .....	91
Figura 35. El efecto piezoeléctrico .....	92
Figura 36. Comportamiento oscilatorio de la adhesión en una superficie de nanopartícula .....	93
Figura 37. Filtros activos y área de superficie .....	94
Figura 38. El transistor de efecto de campo del nanotubo de carbono .....	95
Figura 39. Una CPU tiene billones de transistores .....	96
Figura 40. Como funciona un switch eléctrico ordinario_Los transistores como interruptores.....	97
Figura 41. Las Corrientes eléctricas son afectadas por campos eléctricos. Éste es llamado el efecto de campo .....	98
Figura 42. ¿Cómo funciona El Transistor de Efecto de Campo de Unión?.....	99
Figura 43. Transistores: El operador booleano AND .....	101
Figura 44. Simulación es una versión simplificada de compuerta logica OR .....	102
Figura 45. Simulación muestra cómo funciona un MOSFET .....	103
Figura 46. Metodología de desarrollo del proyecto .....	107

Figura 47. Relación modelo anatómico y modelo de unión de segmentos .....	108
Figura 48. Péndulo doble fase oscilación.....	109
Figura 49. Tipos de funcionamiento.....	111
Figura 50. Hardware Evolutivo.....	113
Figura 51. Entradas del sistema .....	114
Figura 52. Clonada Vs Real.....	115
Figura 53. Error de Clonación .....	116
Figura 54. Evolución de la calificación .....	116
Figura 55. Árbol de decisión .....	117
Figura 56. Gráfica de la señal objetivo.....	118
Figura 57. Gráfica del error.....	119
Figura 58. Sistema fuzzy integrado.....	120
Figura 59. <i>Diseño de flujo vertical de la termocupla</i> .....	121
Figura 60. Imagen de distribución Termica del circuito.....	122
Figura 61. <i>Sistema fuzzy nanosensor</i> .....	123
Figura 62. <i>Rule viewer del sistema de control</i> .....	123
Figura 63. Transmisión en automotores con eje homocinético .....	124
Figura 64 Eje homocinético.....	125
Figura 65. Eje homocinético (Proceso de Ensamble) .....	125
Figura 66. Sistema fuzzy integrado.....	125
Figura 67. Sistema fuzzy nano sensor_ Sistema fuzzy nano sensor (desviación) .....	126
Figura 68. <i>Característica corriente-voltaje elementos de circuitos</i> .....	127
Figura 69. <i>Modelo del Sensor para el control del tráfico vehicular basado en el método piezoeléctrico</i> .....	130
Figura 70. Sensor de temperatura .....	133
Figura 71. Sistema Fuzzy .....	137

Figura 72. Las reglas que permitan cumplir con el objetivo .....138

Figura 73. Comportamiento de los sensores cuando se encuentran en determinadas condiciones .....138

## LISTA DE TABLAS

Tabla 1. En qué consiste las tecnologías usadas en la fabricación a nanoescala _Enfoque de arriba hacia abajo (Top Down).....	24
Tabla 2. En qué consiste las tecnologías usadas en la fabricación a nanoescala _Enfoque de abajo hacia arriba (Boottom up).....	25
Tabla 3. DNA CODE nano sensor .....	41
Tabla 4. DNA CODE nano actuador .....	42
Tabla 5. Estados de Bell que representan el entrelazamiento de dos qubits.....	55
Tabla 6. Propiedades físicas de los nanotubos de carbón.....	59
Tabla 8 Transistores: El operador booleano AND.....	100
Tabla 9. Transistores: la puerta logica OR.....	101
Tabla 10. Operaciones Célula madre .....	113
Tabla 11. <i>Sistema fuzzy (resultados)</i> .....	126
Tabla 12. Resumen de las condiciones a las cuales puede estar sometida una vía y la señal o la acción que se realiza para que la central de control esté actualizada con respecto a las condiciones en las cuales se encuentra el sistema .....	136
Tabla 13. Nanomateriales.....	169



## LISTA DE ANEXOS

Anexo 1 Nanomateriales.....	168
Anexo 2 Molecular Workbrech.....	187
Anexo 3 Software Visual Molecular Dynamics VMD .....	199
Anexo 4 Software RasMol.....	218
Anexo 5 Hilos moleculares basados en polímeros de coordinación .....	230

## RESUMEN

En los últimos años la Nanotecnología se ha convertido en uno de los más importantes y apasionantes campos de evolución en Física, Química, ingeniería y Biología. Se trata de una tecnología que ofrece posibles soluciones a muchos problemas actuales mediante materiales, componentes y sistemas más pequeños, más ligeros, más rápidos y con mejores prestaciones; contribuyendo de manera relevante al desarrollo económico y social.

Resulta prometedora en el sentido de que en un futuro cercano suministrara muchos avances que cambiarán los logros tecnológicos en un amplio campo de aplicaciones como lo es la ingeniería electrónica, más aun si a esta se la fusiona con ramas importantes como es la química, física, etc.

Para este documento se realizó una investigación bibliográfica de artículos, programas y libros sobre el tema para así crear un documento donde se da a conocer de una forma general lo que se pretende con la investigación.

## 1. INTRODUCCIÓN

Hoy se sabe que las propiedades del mundo nano han sido aprovechadas por la humanidad en distintos momentos históricos de manera empírica y la mayoría de los consumidores ni siquiera están al tanto, según la National Nanotechnology Initiative (NNI) ya existen más de 800 productos comerciales de todos los días que se basan en materiales y procesos a nanoescala; sin embargo, el conocimiento de las propiedades extraordinarias de los nanomateriales y sus posibilidades de aplicación representan una de las novedades científicas de los últimos tiempos. La electrónica es una de las grandes beneficiadas de la investigación en nanotecnología. Por lo anterior se puede decir que la nanotecnología es transversal a varias disciplinas, teniendo así múltiples campos o áreas de intervención. Por ejemplo, esta ciencia aplicada puede utilizarse en el campo electrónico en la creación de dispositivos menores y más potentes: nano-partículas contenidas en películas finas que recubren las lentes de los espejuelos las protegen de arañazos (además de disminuir la reflexión de la luz); en la producción de energía, en la fabricación de armamentos o sistemas de defensa, en el tratamiento de agua para transformarlas en potable, en la producción agrícola-ganadera, en la medicina (en el diagnóstico de enfermedades, en el tratamiento del cáncer algunos nano-cristales son luminiscentes y posibilitan la localización y la delimitación precisa de un tumor), en la construcción edilicia, en la industria de cosméticos (hay nano-partículas que aumentan la capacidad de absorción de la piel y son empleadas en el tratamiento anti-envejecimiento), en la producción de alimentos transgénicos, en la informática, aeronáutica (en la obtención de materiales más leves, moldeables y resistentes), en derrames de petróleo (nano-partículas magnéticas pueden minimizar los daños durante los derramamientos de petróleo en el mar) etcétera.

A su vez es importante mencionar que se han venido creando simulaciones en las computadoras, de tal manera poder adelantarse a los hechos que están por venir. De esta forma se minimiza los costos, esto en pro de la optimización de procesos productivos que beneficien la humanidad.

Por esta variedad de aplicaciones de la nanotecnología es que en muchos países se destinan una gran cantidad de presupuesto tanto público como privado para la investigación y el desarrollo de nuevas aplicaciones las cuales pueden traer muy buenos beneficios como así también desarrollos quizás no tan positivos, como el caso de los armamentos.

En la monografía se aborda la metodología de diseño, desarrollo y aplicación de micro- y nanoinstrumentación para la Automatización Industrial soportada en sistemas de Automatización y diagnóstico en tiempo real orientados a aplicaciones en sistemas de control avanzados inteligentes e instrumentados de seguridad para Plantas Industriales, se presentan nuevos modelos para la simulación de sistemas micro- y nanotecnológicos (nanosensor-controlador-nanoactuador) basados en la teoría cuántica, las relaciones de comportamiento de espinelectrones como parte del flujo de información para la medición y control de los parámetros asociados sistemas de control avanzados e instrumentados de seguridad con aplicaciones en Plantas Industriales se muestran los criterios de semejanza por metodologías de diseño Top-down Bottom-up basados en células madres mecatrónicas evolutivas para la medición y control inteligente de los parámetros tecnológicos hasta el tercer nivel de la pirámide de automatización

Este es un tema de poca profundización y conocimiento en la comunidad colombiana, por lo tanto es necesario que la alfabetización científica sea la única manera capaz de calificar y motivar a los jóvenes sobre este nuevo enfoque, de tal manera que se preparen nuevas mentes para una nueva era tecnológica.

## 1.1. OBJETIVOS

### 1.1.1. Objetivo General

El objetivo de la monografía de compilación es el de Diseñar y desarrollar de sistemas de control industrial inteligentes basados en micro y nanoinstrumentación \_MEMS & NEMS para la Automatización de Plantas Industriales, para este propósito se realizó una investigación bibliográfica de artículos y libros sobre el tema para así crear un documento donde se da a conocer de una forma general lo que se pretende con la investigación

### 1.1.2. Objetivos Específicos

- Analizar la metodología de diseño, desarrollo y aplicación de micro- y nanoinstrumentación para la Automatización Industrial soportada en sistemas de Automatización y diagnóstico en tiempo real orientados a aplicaciones en sistemas de control avanzados inteligentes e instrumentados de seguridad para Plantas Industriales.
- Recopilar información pertinente a través de bibliografía actualizada para que el estudio nuevos modelos para la simulación de sistemas micro- y nanotecnológicos (nanosensor-controlador-nanoactuador) basados en la teoría cuántica como parte del flujo de información para la medición y control de los parámetros asociados sistemas de control avanzados e instrumentados de seguridad con aplicaciones en Plantas Industriales
- Establecer los criterios de semejanza por metodologías de diseño Top-down y Bottom-up basados en células madres mecatrónicas evolutivas para la medición y control inteligente de los parámetros tecnológicos hasta el tercer nivel de la pirámide de automatización.

## 2. MARCO TEÓRICO

### 2.1 CONCEPTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA

La palabra nanotecnología es usada extensivamente para definir las ciencias y técnicas que se aplican al un nivel de nanoescala, esto es unas medidas extremadamente pequeñas nanos que permiten trabajar y manipular las estructuras moleculares y sus átomos. En síntesis nos llevaría a la posibilidad de fabricar materiales y máquinas a partir del reordenamiento de átomos y moléculas.

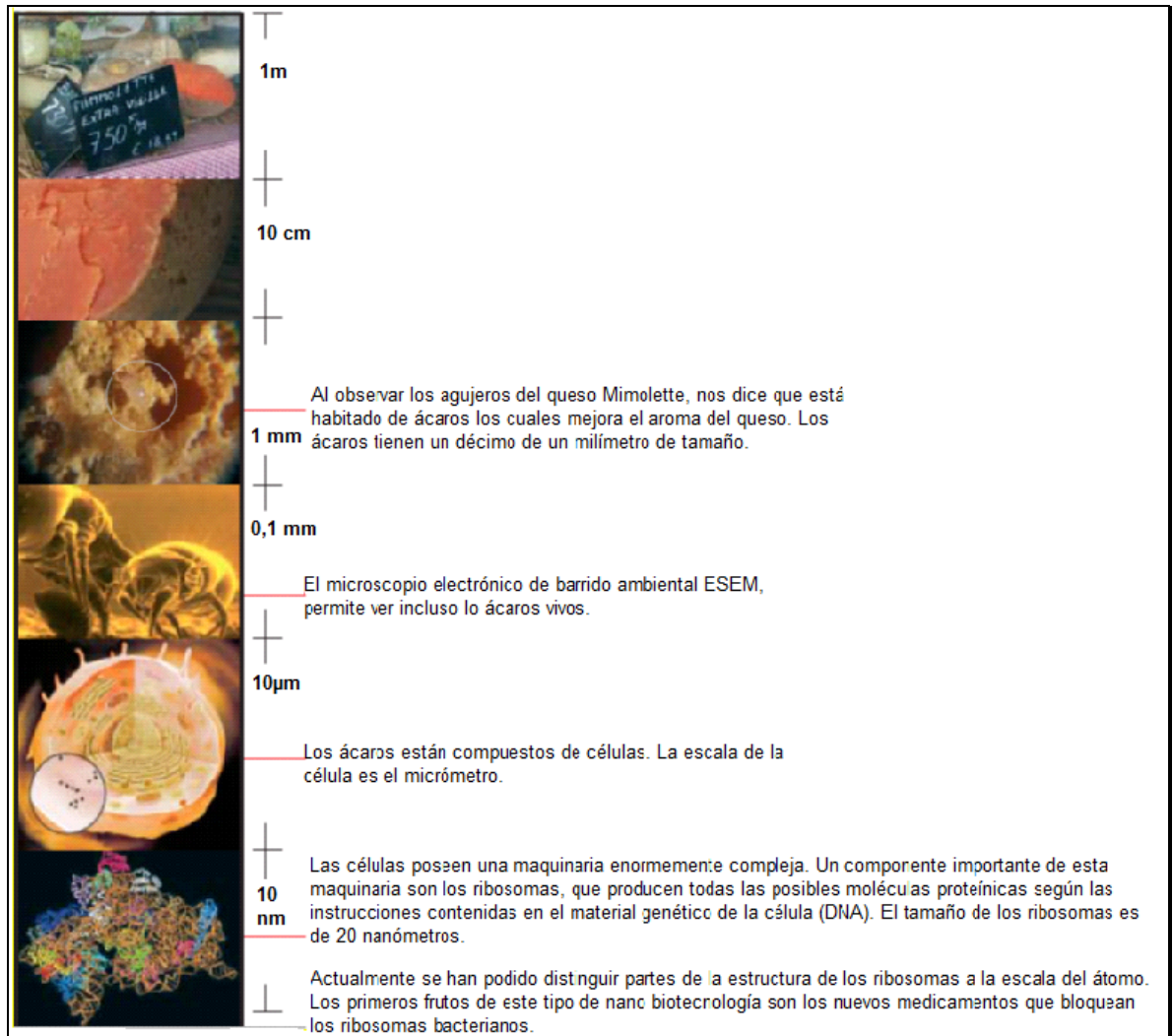
Siguiendo con la definición, La nanotecnología es el estudio, diseño, creación, síntesis, manipulación y aplicación de materiales, instrumentación y sistemas funcionales a través del control de la materia a nano escala, y la explotación de fenómenos y propiedades de la materia esa misma escala.

Cuando se manipula la materia a la escala tan minúscula de átomos y moléculas, demuestra fenómenos y propiedades totalmente nuevas. Por lo tanto, científicos utilizan la nanotecnología para crear materiales, instrumentación y sistemas novedosos y poco costosos con propiedades únicas.

**Nanociencia:** es el campo interdisciplinario de ciencia dedicada al estudio de fenómenos y principios fundamentales de las moléculas y estructuras de dimensiones 1 y 100nm. Éste es el mundo de átomos, moléculas, macromoléculas, puntos cuánticos, y estructuras macromoleculares.

A continuación se puede visualizar un ejemplo de las dimensiones o escala nanométrica:

Figura 1. Queso Mimolette, un ejemplo de las dimensiones o escala nanométrica



Fuente: Renzo Tomellini; La nanotecnología. Innovaciones para el mundo del mañana. Nanotecnologías y nanociencias, materiales multifuncionales basados en el conocimiento y nuevos procesos y dispositivos de producción. Comisión Europea, Dg Investigación. 2004. 8p.

**Nanomateriales:** Material compuesto de una o más sustancias de las cuales una tiene dimensiones a nanoescala, por ejemplo, nanopartículas dispersas sobre un material sólido.

Engloba todos aquellos materiales desarrollados con al menos una dimensión entre 1-100nm (escala nanométrica). Cuando esta longitud es, además, del orden o menor que alguna longitud física crítica, tal como la longitud de Fermi del electrón o la longitud de un monodominio magnético, aparecen propiedades

nuevas que permiten el desarrollo de materiales y dispositivos con funcionalidades y características completamente nuevas. Los nanomateriales pueden ser subdivididos en nanopartículas, nanocapas y nanocompuestos.

En esta área, por lo tanto, se incluyen agregados atómicos (clusters) y partículas de hasta 100nm de diámetro, fibras con diámetros inferiores a 100nm, láminas delgadas de espesor inferior a 100nm, nanoporos y materiales compuestos conteniendo alguno de estos elementos. La composición del material puede ser cualquiera, si bien las más importantes son silicatos, carburos, nitruros, óxidos, intermetálicos, metales, polímeros orgánicos y materiales compuestos.

En las últimas décadas el enfoque de la nanotecnología está dado hacia la búsqueda de nuevos materiales con nuevas funciones, nuevas características, con excelentes propiedades mecánicas y de bajo peso. También se busca optimizar sus propiedades para fabricar dispositivos y materiales que puedan superar limitaciones actuales, ya sea variando su estructura molecular o su composición química.<sup>1</sup>

**Nanocompuestos:** son materiales formados por dos o más fases, donde al menos una de estas tiene sus dimensiones en escala nanométrica. Dentro de este grupo se encuentra compuestos de metales, polímeros y materia biológica que permiten comportamiento multifuncional, aplicados donde la pureza, conductividad eléctrica importan, como llantas de automóviles, equipos deportivos como raquetas y pelotas de tenis, ropa, textiles, microelectrónica, antisépticos entre otros.<sup>2</sup>

**Nanofabricación:** Término general que hace referencia a crear y ensamblar estructuras a nanoescala. Fabricar equipos, máquinas y productos con base en un reordenamiento de átomos y moléculas.

**Un MEMS** es una estructura mecánica miniaturizada de geometrías y materiales diversos que convierte y acondiciona, en el caso de sensores, una cantidad no

---

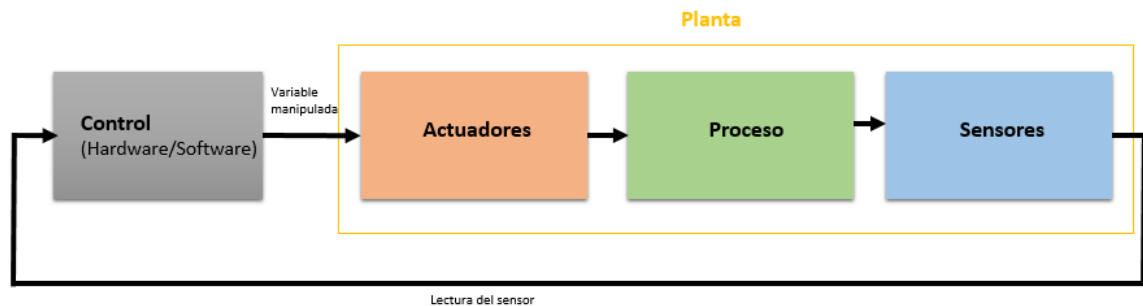
<sup>1</sup> Euroresidentes. Nanomateriales. 2017. Disponible en: <http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/diccionario/nanomateriales.htm>

<sup>2</sup> Vega Mina, D. Nanocompuestos de matriz polimérica. Tesis Licenciatura. Ingeniería Química con área en Ingeniería de Procesos. Departamento de Ingeniería Química y Alimentos, Escuela de Ingeniería, Universidad de las Américas Puebla. 2017. Disponible en: [http://catarina.udlap.mx/u\\_dl\\_a/tales/documentos/leip/vega\\_m\\_d/indice.html](http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/leip/vega_m_d/indice.html)



eléctrica, como presión, temperatura o concentraciones de sustancias químicas, generalmente en señales eléctricas. En el caso de un transductor MEMS, las señales eléctricas resultantes se acondicionan, ya sea para seguir procesándose o para exhibirse adecuadamente para su interpretación o lectura. Actualmente, los circuitos electrónicos para realizar el acondicionamiento ya están integrados al dispositivo. Por consiguiente, un MEMS no sólo desempeña la función de detectar (microsensores), sino también de acondicionar respuestas (circuitos integrados) y de generar acciones (microactuadores).<sup>3</sup>

Figura 2. Las señales eléctricas resultantes o parámetro objeto de control (Temperatura, resistencia, fuerza, torque) se acondicionan, ya sea para seguir procesándose o para exhibirse adecuadamente para su interpretación o lectura



Elaborado por autora.

Los materiales utilizados para la fabricación de MEMS pueden ser: metales, semiconductores, cerámicas, polímeros y composites. Los metales son usados principalmente para establecer interconexiones y contactos óhmicos que se realizan por evaporación. El semiconductor más usado para la fabricación de MEMS es el silicio y compuestos basados en silicio. Esto se debe, por un lado, a que este elemento presenta las características químicas, estructurales y técnicas apropiadas para desarrollar dispositivos robustos y, por otro, a que la tecnología para la fabricación de dispositivos electrónicos basados en silicio ha sido mejorada de manera significativa y se encuentra disponible en muchos laboratorios. Las cerámicas son materiales inorgánicos que se forman con elementos metálicos y no metálicos unidos químicamente. Entre estos materiales están la alúmina (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), cloruro de sodio (NaCl) o superconductores cerámicos como YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6.5</sub> (Gardner et al. 2001). Por sus características de bajo peso, dureza, alta resistencia a la temperatura, baja fricción y propiedades aislantes, entre otras, estos materiales se han usado como sustratos en la fabricación de

<sup>3</sup> PABLO R. HERNÁNDEZ RODRÍGUEZ Bioelectrónica, Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINEVESTAV IPN, México.

micromáquinas o materiales de pasivación en los MEMS. Por sus excelentes características eléctricas aislantes, los polímeros desempeñan la función de pasivación en la fabricación de los MEMS. Entre los materiales poliméricos ampliamente usados se tienen: epóxicos, poliéster, nylon y siliconas. Los composites son materiales producto de la combinación de dos o más materiales. La mayoría de los composites están formados por un material de relleno, que determina sus características de fortaleza, rigidez o conductividad y un material fijador que mantiene rígidamente unida a la mezcla. Su uso en la fabricación de los MEMS también es generalmente de pasivación.

## 2.2. HISTORIA DE LA NANOTECNOLOGIA

### **Siglo IV dc\_ 1920 Prenaotecnologia:**

- Copa de lycurgus.
- Vitrales de la edad media.
- Espada de Damasco.
- Langmuir y Bodgett introducen el modelo de monocapa.

**1959** Richard Feynman da su discurso “There is plenty room at the bottom” donde propuso la posibilidad de maniobrar materia a pequeña escala (átomo por átomo).

**1974** El profesor Norio Taniguchi de Tokio Science le da el nombre a este campo: *Nanotecnología* en el artículo “On the basic concept nanotechnology”

**1981** La nanotecnología moderna es posible a Gerd Binnig y Heinrich Rohrer quienes inventaron el microscopio de escaneo túnel que permitió “ver, tomar y mover” átomos de manera individual y así construir nuevas cosas de nuevas maneras.

Microscopio de Barrido "Scanning" por Efecto Túnel (STM) se puede definir como una máquina capaz de revelar la estructura atómica de las partículas. Las técnicas aplicadas se conocen también como de barrido de túnel y están asociadas a la mecánica cuántica. Se basan en la capacidad de atrapar a los electrones que escapan en ese efecto túnel, para lograr una imagen de la estructura atómica de la materia con una alta resolución, en la que cada átomo se puede distinguir de otro.

**1985** Los investigadores Robert F. Curl Jr., Harold W. Kroto y Richard E. Smalley descubren los fundamentos conocidos como “buckyballs” de alrededor de un nanómetro de diámetro, los cuales son usados para hacer nanotubos de carbono. 1996 obtuvieron el Premio Nóbel de Química.

Hoy en día son los nanomateriales más presente en diferentes campos.

### **Nuevos nanomateriales**

Buckyballs: Una nanoestructura compuesta de 60 átomos de carbón (su nombre químico es C<sub>60</sub>) estructurados en un espacio cerrado y perfectamente simétrico, tienen propiedades extraordinarias, especialmente como superconductores. Es una nueva forma del carbono y tiene una geometría similar a un icosaedro, con la estructura en forma de balón de fútbol. La superficie de la imagen entrevé las formas de buckyballs en su estructura. Las buckyballs superconductoras muestran la temperatura crítica más alta que se haya encontrado en compuestos orgánicos y se asocian en nanotecnología a los nanotubos.

La mezcla de poliuretano y las Buckyballs (balones de Bucky) en una fina película sobre una superficie plana, las partículas de luz que viajan a través del material adoptan con facilidad los patrones de las demás incrementando la potencia del transporte y procesado de información de las comunicaciones. Recientemente, se ha conseguido una versión más pequeña de las Buckyballs. Se cree que tienen propiedades electrónicas y magnéticas poco usuales porque tienen curvas más acentuadas y una forma entre una esfera y un disco.

**1986** En los laboratorios de investigación IBM, es inventado el microscopio de fuerza atómica.

**1989** IBM en el laboratorio de California deletrea el logo de la compañía usando 35 átomos de xenón, usando la punta de un microscopio de efecto túnel scannig (STM), demostrando posteriormente la manipulación de nanopartículas.

**1991** Sumio Lijima de NEC crea un nanotubo de carbono.

**1998** El Consejo de ciencia y tecnología de la casa blanca crea el grupo de Nanotecnología para la financiación de proyectos en nanotecnología.

**1999** Aparecen en el mercado global los primeros productos que emplean nanotecnología.

**2001** El presidente de Estados Unidos Bill Clinton lanza iniciativa Nacional para el Avance de Nanotecnología.

## **2002**

- Microscopía Óptica en Escala nanómetros: Científicos utilizan la óptica convencional y obtener una imagen de un cúmulo de bacterias, a sólo 33 nanómetros aproximadamente.
- Imagen basada en nanotubos de carbono: Los nanotubos de carbono se han utilizado como la base de un dispositivo de rayos X de cátodo frío. Se ha utilizado para capturar la imagen de un pescado y una mano humana.
- Las nanopartículas etiquetadas para la detección: Sondas de nanopartículas se han desarrollado para la detección de ADN con "huellas dactilares" únicas.
- Nanopartículas para destruir las bacterias: Nanopartículas de óxido de magnesio matan bacterias

- Nanografía hace patrones de ADN diminutos: Patrones de ADN que son una milésima del tamaño de aquellos micro arreglos disponibles comercialmente que han sido desarrollados. Este método podría ayudar a crear dispositivos para secuenciamiento de ADN, sensores biológicos y diagnóstico de las enfermedades más rápidos y más poderosos.
- Se crea el primer nano escritor láser GaN nanocable.
- Nanotubos de carbono son mejores que los transistores silicio: Se afirma que un transistor de nanotubos de carbono tiene mejores propiedades que los transistores de silicio de un tamaño equivalente.
- Nanoporos artificiales detectan moléculas de ADN: El sensor electrónico en el chip detectó moléculas individuales de ADN.

### **2003**

- Hallas, West y colaboradores desarrollan nanocapsulas de oro con capacidad de absorción cerca al infrarojo, lo cual sirve como plataforma para el diagnóstico de cáncer de mama, sin usar métodos invasivos.
- Transistor superconductor: Un amplificador superconductor ha sido construido con las más altas ganancias de corriente y potencia hasta la fecha.

### **2004**

- La Comisión Europea crea la estrategia europea alrededor de la nanotecnología.
- La Real Sociedad Británica y la Real Academia de Ingeniería publican "Nanociencia y nanotecnología oportunidades e incertidumbres".
- Se crea el primer College de Ciencia de nanoescala e ingeniería.

### **2005**

Eric Winfree y Paul Rothmund del Instituto de Tecnología de California desarrollan teorías del "la computación basada en ADN y autoensamblaje algorítmico".

Se crea un Nanomotor molecular unidireccional impulsado por la energía química. Este motor obtiene su energía a partir de productos químicos

**2006** Tour y Colaboradores de la Universidad de Rice crean el primer carro a nanoescala.

**2007** Angela Belcher y colaboradores de MIT desarrollan la primera batería de iones de litio usando virus que no son dañinos para la salud.

**2008** Se publica por primera la iniciativa Nacional de Investigación en Nanotecnología relacionada con medio ambiente, salud y seguridad.

**2009\_2010** Naadrian Seeman y colaboradores de la Universidad de Nueva York crean simuladores ADN de dispositivos robóticos a nanoescala.

**2010** IBM utilizó una punta de silicón que medía unos cuantos nanómetros (similar a las puntas utilizadas en los microscopios atómicos) para crear un mapa tridimensional de los relieves mundiales, demostrando que los patrones a nanoescala reducen costos en áreas como: electrónica, optoelectrónica y medicina.

**2011** El Subcomité NSET actualiza tanto el Plan Estratégico, medio ambiente, salud y Estrategia de Investigación de Seguridad del NNI (National Nanotechnology Initiative), sobre la base de una amplia contribución de talleres públicos y de diálogo en línea con las partes interesadas de Gobierno, la academia, las organizaciones no gubernamentales y el público, y otros.

**2012** La NNI (National Nanotechnology Initiative) lanzó dos iniciativas más Nanotecnología nanosensores y la Infraestructura Nanotecnología Conocimiento para un total de cinco institutos nacionales de estadística.

**2013** Investigadores -Stanford desarrollan el primer ordenador de nanotubos de carbono.<sup>4</sup>

---

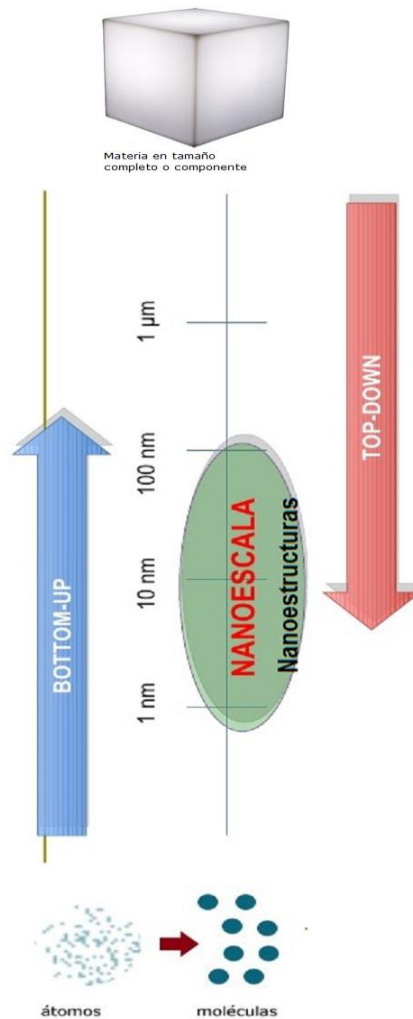
<sup>4</sup> Nano.gov. National Nanotechnology Initiative. Nanotechnology Timeline. 2017. Disponible en: [www.nano.gov/timeline](http://www.nano.gov/timeline)

### 2.3. MÉTODOS DE NANO FABRICACIÓN

Existen principalmente dos formas de aplicar la nanotecnología hasta el momento: la primera consiste en un enfoque de arriba hacia abajo (Top Down), en el que las estructuras se van reduciendo cada vez más hasta alcanzar la escala nanométrica; la segunda es el enfoque de abajo hacia arriba (Bottom up), en virtud del cual se eligen varios elementos a escala nanométrica y se reúnen para formar algún tipo de materia o mecanismo. Esta forma de manipular la materia a nivel atómico abarca lógicamente un campo de aplicaciones potenciales inmenso.

La siguiente figura representa los dos métodos de nanofabricación.

Figura 3. Enfoques Top Down y Bottom up



**Tabla 1. En qué consiste las tecnologías usadas en la fabricación a nanoescala \_Enfoque de arriba hacia abajo (Top Down)**

Enfoque de arriba hacia abajo o Top Down				
Técnica	Fotolitografía	Litografía de haz de electrones	Litografía de rayos X	Litografía suave
<b>Usos</b>	Empleada para hacer microchips para computadores y estructuras de tamaño inferior a 100nm.	Para micromaquina do MEMS y NEMS.	Fabricación de dispositivos electrónicos.	Fabricación de microestructuras con aplicaciones biológicas.
<b>Descripción</b>	Durante el proceso se emplea un sustrato rígido usualmente una oblea de silicio, la cual es recubierta por un material fotosensible, luego es expuesta a luz ultravioleta, rompiendo las cadenas poliméricas, posterior a esto se sumerge en una solución reveladora dejando expuesto el patrón en la superficie de la oblea.	Durante el proceso se utiliza una película polimérica y el patrón es trazado usando un haz de electrones, mejorando la resolución.	Los efectos de la difracción son minimizados debido a la longitud de onda de los rayos x.	Los procesos para estampado, impresión y moldeado, usan procesos mecánicos en vez de electrones o fotones. El proceso empieza con la construcción de un molde usando fotolitografía o litografía por haz de electrones. Se usan polímeros y el ataque químico se hace con PMDS, lo que da como resultado un estampado que corresponde con el patrón del molde.
<b>Desventajas /Ventajas</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Se dificulta la producción de nano estructuras inferiores a 100nm debido a efectos de difracción.</li> <li>• Se necesita una perfecta alineación del patrón en la oblea.</li> <li>• Es necesario controlar los defectos cuidadosamente.</li> <li>• Las herramientas empleadas son muy costosas.</li> </ul>	Es una técnica costosa y demorada.	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Los lentes convencionales no son capaces de enfocar los rayos x.</li> <li>▪ Con frecuencia la radiación daña los materiales usados para las máscaras y los lentes.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ Son varias las ventajas de esta técnica, como su bajo costo. No se requieren equipos especializados, se producen variedad de formas geométricas.</li> <li>▪ Como desventaja, debido al uso de polímeros, con frecuencia se presentan manchas que no son útiles en algunos campos, como la nanoelectrónica.</li> </ul>

Fuente: Reyes Meneses Andrea. Castro Castas, Jairo Antonio. Caracterización y aplicación de materia a nanoescala. Bogotá. 2013, 7p



Tabla 2. En qué consiste las tecnologías usadas en la fabricación a nanoescala \_Enfoque de abajo hacia arriba (Bottom up)

<b>Enfoque de abajo hacia arriba o Bottom up</b>			
<b>Técnica</b>	<b>Química molecular y supramolecular</b>	<b>Sondas de exploración (Scanning probes)</b>	<b>Biología</b>
<b>Usos</b>	Nanotubos de carbono y puntos cuánticos.	Análisis de arreglos de átomos en una superficie; también pueden ser usados para mover átomos.	Construcción de secuencias de ADN y ensamblaje artificial de virus; biomotores, biosensores, cajas de ADN, computación.
<b>Descripción</b>	Esta técnica está basada en el concepto de autoensamblaje, el cual se basa en el diseño de moléculas que se agregan en estructuras deseadas.	Esta técnica usa puntas para escanear superficies de materiales.	En esta área se usan diferentes técnicas para la manipulación del ADN, lo cual busca construir estructuras de diferente forma que sirvan como plataforma para el ordenamiento de nanomateriales con alta especificidad y precisión.
<b>Desventajas/ Ventajas</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Puede ligar estructuras biológicas con estructuras inorgánicas que actúan como componentes de un sistema.</li> <li>• Produce estructuras que son relativamente libres de defectos.</li> </ul>		La precisión del autoensamblaje disminuye la probabilidad de crear estructuras defectuosas.

Fuente: Reyes Meneses Andrea. Castro Castas, Jairo Antonio. Caracterización y aplicación de materia a nanoescala. Bogotá. 2013, 8p

### 2.3.1. Diseño, desarrollo nanosensores por fabricación basados en la técnica del electrohilado para implementación en nanoinstrumentación

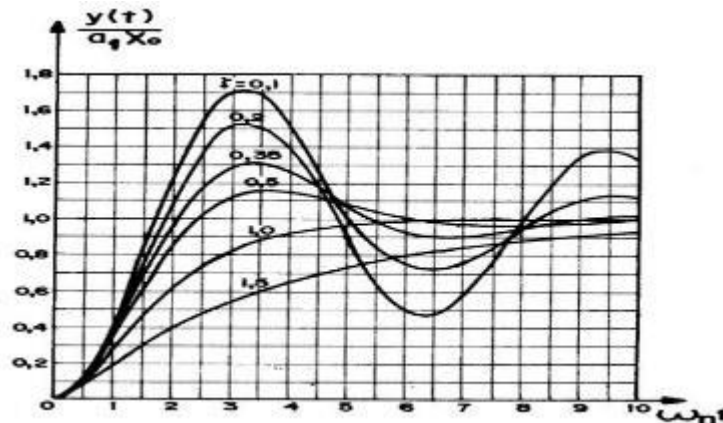
El diseño desarrollo de nanosensor de deformación (carga), presión y fuerza por por fabricación basados en la técnica del electrohilado para implementación de nanoinstrumentación a partir de nanohilos PVA

Para la medición de deformaciones forma indirecta relacionada con tensoelementos basados en nanohilos de polímeros conductores, su resistencia eléctrica cambia en forma proporcional a la deformación, desde el punto del diseño en ingeniería, el elemento tensométrico es lineal su deformación longitudinal unitaria y conduce la variación de su resistencia eléctrica a partir de la relación conocida de:

La resistencia del conductor es:

$$R = \rho L/A \cdot [\Omega]$$

Figura 4. Respuesta a dimensional de un instrumento de segundo orden



Fuente: Antonio Faustino Munoz

Si se deforma en la dirección del conductor, los tres parámetros  $\rho$ ,  $L$  y  $A$  han de variar. Entonces la resistencia variará según

$$dR = \frac{\partial R}{\partial \rho} \cdot d\rho + \frac{\partial R}{\partial L} \cdot dL + \frac{\partial R}{\partial A} \cdot dA;$$

Donde

$$\frac{\partial R}{\partial \rho} = L/A; \quad \frac{\partial R}{\partial L} = \rho/A; \quad \frac{\partial R}{\partial A} = -\rho L/A^2$$

Entonces

$$dR = \frac{A(\rho dL + Ld\rho) - \rho LdA}{A^2}$$

La sección transversal se puede reducir a una sección circular de diámetro equivalente  $d_e$ . por lo tanto,

$$A = Qd_e^2$$

El conductor es circular,  $Q = \frac{\pi}{4}$ .

Derivando

$$dA = 2Qd_e d(d_e)$$

Recordando la magnitud del coeficiente de poisson

$$\frac{d(d_e)}{d_e} = -\mu \frac{dL}{L}$$

Resulta entonces que

$$dA = -2Qd_e^2 \mu \frac{dL}{L} = -2A\mu \frac{dL}{L}$$

Sustituyendo la ecuación (13) en la ecuación (12)

$$dR = \frac{\rho dL(1 + \mu) + Ld\rho}{A}$$

Eliminando A con la ayuda de la ecuación (11)

$$\frac{dR}{d} = \left(1 + 2\mu + \frac{d\rho/\rho}{dL/L}\right) \frac{dL}{L}$$

Ahora se toma en cuenta que la deformación longitudinal unitaria  $\varepsilon = \Delta L/L$  y entonces

$$\frac{dR}{R} = K_g \varepsilon; \quad K_g = 1 + 2\mu + \frac{d\rho/\rho}{\varepsilon}$$

Se observa que  $K_g$  depende aparentemente de  $\varepsilon$ , pero el término  $(d\rho/\rho)/\varepsilon$  es una propiedad física del material del conductor y se denomina *piezorresistividad*, de forma tal que

$$\frac{d\rho/\rho}{\varepsilon} = \pi_1 E. \quad \text{Ecuación (15)}$$

En la ecuación (15),  $E$  es el módulo de la elasticidad del material y  $\pi_1$  es el coeficiente de *piezorresistividad* longitudinal, pudiendo ser *positivo* o *negativo*.

Finalmente,

$$\frac{dR}{d} = K_g \varepsilon; K_g = 1 + 2\mu + \pi_1 \varepsilon$$

$K_g$  Es el coeficiente del *tensoelemento* y relaciona la deformación longitudinal unitaria (cambio relativo de longitud) con el cambio relativo de resistencia del conductor.

Para la medición de la fuerza y la presión se utilizan nanohilos obtenidos por electrohilado basados en polímeros piezoeléctricos\_ PVDF Para expresar la sensibilidad del cristal en términos de desplazamiento, es necesario conocer el módulo de elasticidad del material. Para el cuarzo el valor del módulo de elasticidad es  $8.6 \cdot 10^4$  MPa y para el titanio de bario  $12 \cdot 10^4$  MPa. La fuerza  $f_1$  se expresa, en términos de esfuerzo y de deformaciones  $x$  como

$$f_1 = \text{esfuerzo} \cdot \text{área} = E \frac{x}{h} \cdot bl$$

Sustituyendo en la ecuación (2) se tiene que:

$$q = \frac{Ebl}{h} \cdot d_{33} \cdot x$$

Finalmente,

$$q = \frac{EA}{h} \cdot d_{33} \cdot x = \frac{EAK_q \varepsilon_0}{h} \cdot g_{33} \cdot x$$

En la expresión (4),  $A(m^2)$  es el área de la sección transversal del elemento piezoeléctrico y  $x$  la deformación con respecto a su espesor inicial  $h$ .

Por ejemplo, la sensibilidad carga-desplazamiento de un elemento de titanio de bario de  $1\text{cm}^3$  de sección y 2mm de espesor es de 0.9 C/m. para deformar el elemento un micrón, hace falta una fuerza de 6000N.

El elemento piezoeléctrico se puede interpretar como un generador de cargas entre sus placas, según la deformación del elemento, es decir, según se acerquen o alejen dichas placas. Esta relación está dada por

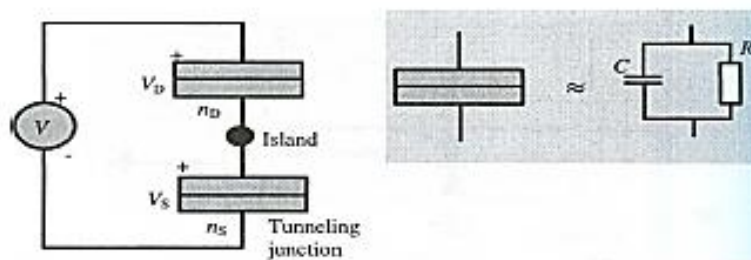
$$Q = K_q x [C]; K_q = \frac{EA}{h} \cdot d_{33} [C/m]$$

También hay una resistencia entre las placas, que es la resistencia de fuga del capacitor formado por las placas y el elemento piezoeléctrico. Su valor depende de la resistividad del material y la separación del área de las placas (electrodos). Para los materiales y las dimensiones la resistencia de fuga  $R_a$  tiene valores del orden de las decenas de gigaohm.

Los dispositivos de un solo electrón están basados en los efectos producidos cuando se inyectan y extraen electrones solitarios de una estructura de tamaño nano quantum, como un nanocluster (arreglo de puntos cuánticos con propiedades similares) o un punto cuántico, ambos denominados genéricamente isla. Por consiguiente, la estructura rudimentaria de un dispositivo de un solo electrón se representa por un inyector de carga (drenaje), una isla de nano-tamaño, y una carga en el colector (la fuente); el voltaje aplicado en la compuerta gate controla el número de cargas en la isla. El inyector de carga y el colector son a menudo uniones de túnel metálicas que consisten en estructuras de punto de contacto. El efecto físico principal relacionado al traslado de un único electrón, desde el inyector a la isla es el bloqueo Coulumb, que consiste en la creación de un hueco en el espectro de energía de la isla que se localiza simétricamente alrededor de la energía de Fermi.

El hueco, se produce por la reestructuración de cargas dentro de la isla, y se vuelve significativa cuando el cambio de potencial asociado es mayor que la energía térmica  $E_{th}$ . Como resultado, el electrón que viaja por un túnel se detiene hasta que la energía de carga sea compensada. La conducta del dispositivo de un solo electrón que es una isla metálica débilmente acoplada a dos electrodos metálicos, puede entenderse del circuito equivalente dibujado en la siguiente figura.

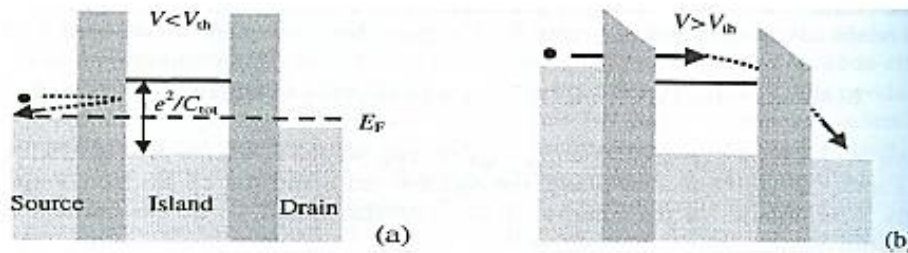
Figura 5. El modelo del circuito equivalente a una isla metálica débilmente acoplada a dos electrodos metálicos en el cual es aplicado un voltaje.



En la figura anterior, la isla es un nanocluster (grupo de puntos cuánticos con propiedades similares) metálica débilmente acoplada (mediante una película aislante delgada) a dos electrodos metálicos. El conjunto compuesto de una película aislante delgada y de un electrodo metálico es una unión túnel, la que inyecta y extrae cargas de la isla. Esta unión túnel puede ser modelada como una

configuración paralela formada por una resistencia túnel  $R_t$  y una capacitancia  $C$ . la caída de voltaje en las dos uniones túnel se denota por  $V_D$  y  $V_S$  y las capacitancias respectivas de los circuitos equivalente son por  $C_D$  y  $C_S$ , los subíndices hacen referencia al drenaje y a la fuente, respectivamente. El régimen de transporte del electrón se llama bloqueo. El régimen bloqueo de Coulomb para el conjunto fuente-isla-drenaje es ejemplificado en la siguiente figura. Cuando un voltaje es aplicado, el voltaje umbral, la energía del vacío Coulomb es  $e^2/C_{tot}$  cercano al nivel de la energía de Fermi lo que suprime el túnel entre los contactos. El voltaje umbral, permite que exista un túnel entre la fuente y el drenaje a través de la isla, de esta forma se evita el bloqueo de Coulomb, como se muestra en la parte b de la siguiente figura. Si  $C_{tot}$  es bastante grande el efecto bloqueo de Coulomb se atenúa fuertemente, y por último desaparece, y se necesita un voltaje umbral muy pequeño.

Figura 6. Regimen de bloqueo de coulomb



Si  $V > e/2C$  ( $V$ = voltaje umbral para vencer bloqueo de Coulomb/ b,  $e$ = energía del electrón,  $C$ = capacitancia total de la isla) y un electrón se encuentra en la isla para, por lo cual  $n=1$  (número de orbitales), y la energía Fermi aumenta por  $e^2/C_{tot}$  un nuevo hueco se forma alrededor del nivel Fermi, se cierra el túnel de un electrón extra que ingrese o salga desde la isla al drenaje es ahora prohibido a menos que se aplique un voltaje umbral aumente a  $V > 3e/2C$ . Entre estos dos valores umbral ningún electrón fluye a través de la estructura hasta el electrón mediante el túnel isla-disipador, hasta que la isla regrese al estado  $n=0$  y el nivel Fermi en la isla disminuye y otro electrón pueda ingresar a la estructura; este ciclo es repetido varias veces.

Si la resistencia túnel en la unión de la fuente es mucho mayor que en la unión del drenaje (si  $R_t = R_{s,t} \gg R_{d,t}$ ), pero las capacitancias correspondientes son iguales, la corriente a través del conjunto fuente-isla-drenaje es controlada por el voltaje  $V_D = V/2 + ne/C_{tot}$  que decae a lo largo de la unión del disipador. El voltaje a través del drenaje disminuye en pasos de  $e/C_{tot}$ , cada vez que el voltaje umbral del drenaje aumenta al incrementar los valores  $n$ . Entonces, los saltos en la corriente están dados por

$$\Delta I = e/C_{tot} R_t$$

$\Delta I$ = salto de corriente;  $e$ = energía del electrón  $C_{tot}$ = capacitancia total de la isla

$R_t$ = resistencia total de la isla

La característica I-V del conjunto fuente-isla-drenaje toma la forma específica de escalera representada en la siguiente figura, la cual refleja el efecto de cara en la isla. Esta sorprendente forma i-V que es una conducta macroscópica de fenómenos quantum sólo ocurre cuando la energía de carga Coulomb prevalece por sobre la energía térmica y cuando las fluctuaciones en el número de electrones en la isla son lo bastante pequeñas para permitir la localización de una carga en la isla. Esta última condición se cumple cuando

$$R_t \gg \frac{h}{e^2} = 25.8 \text{ k}\Omega$$

$R_t$ = resistencia total de la isla

$h$ = constante de Planck

$e$ = energía del electrón

2.3.2. Modelación y simulación de sistemas nanotecnológicos dotados de nanoinstrumentación (nanosensores) asociados a la instrumentación biomédica.

La modelación y simulación de sistemas nanotecnológicos se desarrolla de acuerdo a la metodología basada en sistemas (nanosensor-control-nanoactuador) para el control de bioequipos, nanobiosensores para el diagnóstico de enfermedades infecciosas nano sensores para la medición de los niveles de calcio en los huesos, piel artificial sensible nanobiosensores para el cuerpo humano, nanobiopartículas Tratamiento del Cáncer, nanomarcapasos donde a partir de las señales del sistema se procesan en forma de cluster difusos con técnicas de inteligencia artificial.

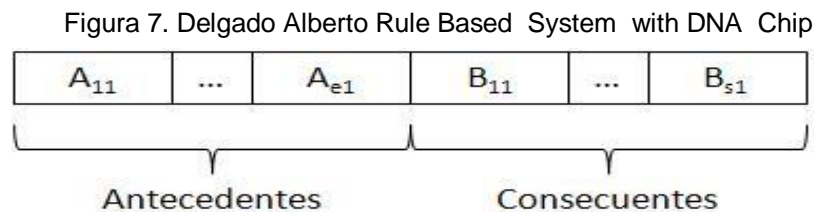
La información de cada subsistema entrada – salida mapeada genéticamente, es decir convertida a cromosomas, constituye las unidades operativas que representan las partes de la operación del controlador y por ende las partes del genoma, lo que permitirá estudiar y optimizar la repercusión de cada variable en el desempeño del sistema.

El perfil del genoma se puede ver como puntos multidimensionales en el espacio, con la dimensionalidad dada por el número mediciones. Los puntos en el espacio se agrupan a través de clústeres representados por las funciones anteriormente definidas y se pueden visualizar a través de la proyección sobre los planos con el

objeto de disminuir su dimensionalidad. Estos grupos definen un hiperplano que es el que identifica el algoritmo genético para realizar la evolución del genoma.

Lo anterior significa que el genoma del controlador está compuesto por unidades operativas, expresadas en código genético con una estructura de antecedentes – consecuentes, definida a través de la generación de las reglas por su forma “*si... entonces*”.

El código genético utiliza la estructura de cromosomas y éste se diseña a través de las siguientes etapas: División del cromosoma en antecedentes y consecuentes. La aplicación de esta estructura del cromosoma se realiza teniendo en cuenta la base de reglas lingüísticas del sistema difuso.



Fuente: Delgado Alberto Rule Based System with DNA Chip

Codificación del cromosoma basada en números enteros en donde cada dígito de los parámetros representa un alelo, el conjunto de los alelos para cada parámetro corresponde a un gen del cromosoma, el conjunto de genes de la variable de entrada corresponde a los antecedentes y el conjunto de genes de la variable de salida corresponde a los consecuentes. La integración de los dos forma un cromosoma.

Consiste en la replicación del genoma para que sea funcionalmente compatible en cuanto a amplitud, frecuencia, capacidad de respuesta, tiempo de establecimiento y otras características dinámicas propias del objeto de control. Las características estáticas aparecen representadas en el clon a través de los parámetros estructurales, dimensionales, de interconexión de las partes mecánicas, electrónicas, neumáticas, etc. (Muñoz, 2004).

En la presente investigación se proponen los Algoritmos Genéticos (AGs), para la aplicación e interpretación del mapeo genético, que contiene los códigos de la estructura funcional de la operación. Cada unidad operativa está formada por elementos unitarios que representan una parte de la operación del dispositivo lo



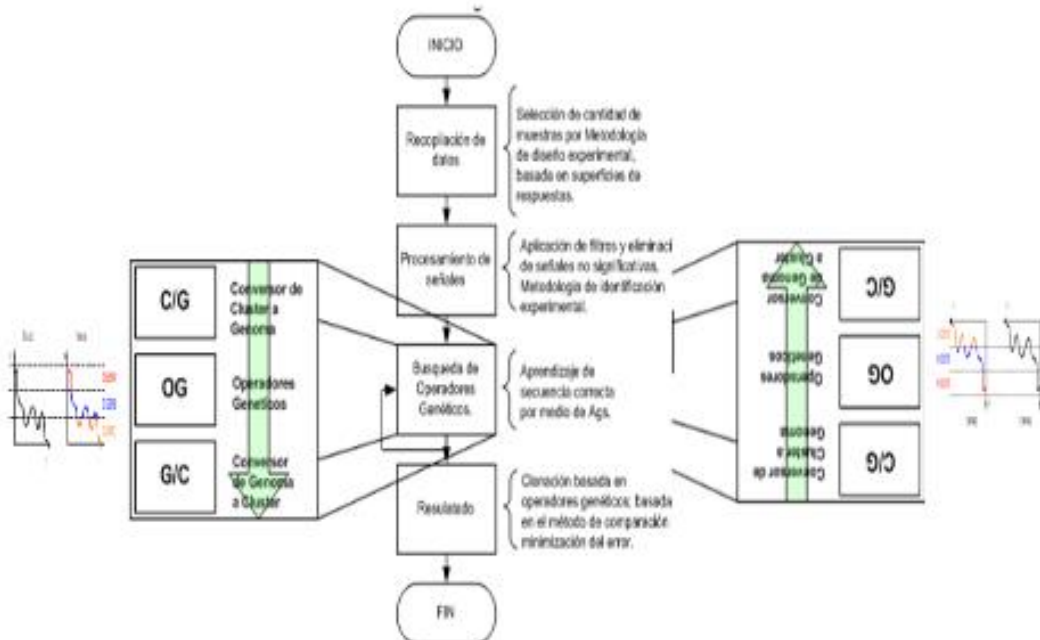
que permitirá estudiar y optimizar la repercusión de cada variable en el desempeño del sistema. El algoritmo genético se encargará de encontrar los parámetros de las funciones de membresía, a partir de la optimización de las reglas del sistema difuso generado en el paso anterior.

La réplica funcional del controlador (clon) la constituye el grupo de unidades operativas funcionales expresadas en conjuntos difusos con parámetros óptimos, encontrados a partir de la evolución a través de algoritmos genéticos.

### 2.3.3. Conceptualización de la metodología de clonación artificial en ingeniería.

La clonación artificial nace en la ingeniería como una alternativa para el desarrollo de medios y sistemas de control avanzado, que permitan responder a las exigencias de la industria, a través de réplicas funcionales de sensores, controladores y actuadores basados en técnicas de inteligencia artificial soportados en sistemas avanzados de clonación artificial y software evolutivo. Esta metodología se presenta en la figura 8.

Figura 8. Diagrama de la metodología aplicada



Fuente: Muñoz Antonio F Nuevos métodos y procedimientos de alta precisión aplicado a pavimentos y vía certificado de registro de soporte lógico – software técnicas de inteligencia artificial basados en algoritmos genéticos para determinar el desempeño a partir de los parámetros de comportamiento Libro - Tomo – Partida 13-40-467 Fecha Registro 03-Feb-2014

La metodología de clonación artificial en ingeniería parte de un sistema basado en conocimiento. Se fundamenta en la teoría de los sistemas expertos; puede partir de información cualitativa, pero igual la base de conocimiento puede estar generada por información de sensores sobre variables físicas del proceso en cuyo caso las reglas son el resultado de la interacción de los datos de entrada – salida.

Para esta metodología se proponen los siguientes pasos:

- Creación de los clusters.
- Creación de los cromosomas.
- Búsqueda de consecuentes.
- Identificar los operadores correctos.
- Crear algoritmo genético que busque la secuencia.
- Evaluar los individuos.
- Seleccionar los mejores (evaluados según error).
- Reproducir y generar nueva población.
- Repetir ciclo optimizando el error.
- Identificación de valores de salida.
- Defuzzificación.

#### 2.3.3.1. Creación de los cluster a través de unidades de extracción de características

Estas neuronas representan los elementos de computación de la segunda capa de la red. Cada neurona de esta segunda capa realiza una transformación lineal sobre la configuración de sus entradas, generando la salida siguiente: ecuación

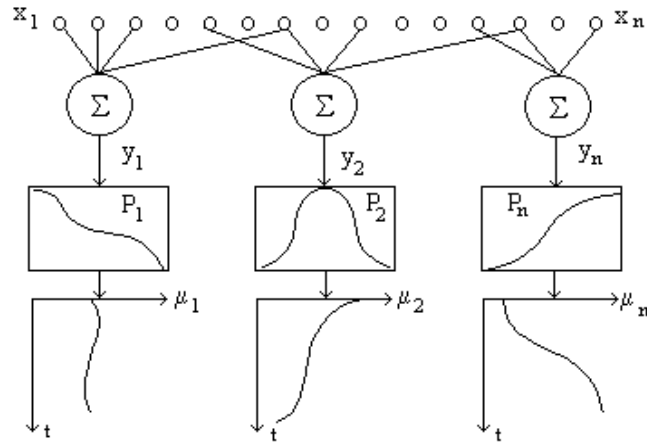
$$y_n = \sum_m w_{nm} \cdot X_m$$

∀ Campo receptivo  $m$  asociado a  $Nn$

Los pesos  $w$  representan los valores relativos asociados por cada neurona a la variable  $X_m$ . Finalmente, obtenido el nivel de excitación  $y_n$ , se utiliza una función de activación que puede ser identificada como una distribución difusa que asocia un grado de compatibilidad a cada valor de excitación.

El objetivo de estas unidades es describir el medio en términos de un conjunto de propiedades  $\{\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \dots, \mathbf{P}_n\}$ , (Figura 57) necesiándose tantas unidades como propiedades queramos utilizar para describir el medio.

Figura 9. Unidades de extracción de características que generan funciones de pertenencia y las correspondientes caracterizaciones del espacio de entrada



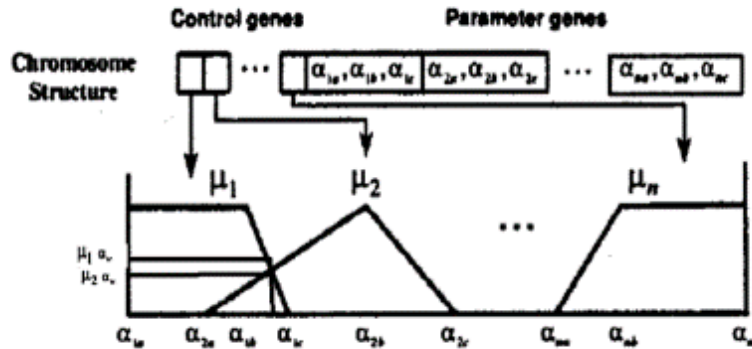
Fuente: (Jang y Sun, 1993)

Puede notarse, que bajo ciertas restricciones, el comportamiento de estas estructuras neuronales es funcionalmente equivalente al de algunos SLD (Jang y Sun, 1993), por lo que pueden utilizarse metodologías de identificación estructural y de parámetros propios de este tipo de sistemas. Con ello, podría configurarse la estructura neuronal inicial, asumiéndose, en este caso, una cantidad importante de conocimiento a priori.

### 2.3.3.2. Creación de cromosomas

La codificación seleccionada para los cromosomas está basada en los grados de pertenencia de las funciones de membresía en donde cada dígito de los parámetros representa un alelo, los parámetros están representados por cuatro dígitos, el conjunto de los alelos para cada parámetro corresponde a un gen del cromosoma, el conjunto de genes de la variable de entrada corresponde a los antecedentes y el conjunto de genes de la variable de salida corresponde a los consecuentes y la integración de los dos, forman un cromosoma. La integración de los genes genera el cromosoma. Con base en la estructura antecedentes – consecuentes; un ejemplo de cromosoma es el que se muestra en la figura 10

Figura 10. Procedimiento de jerarquía del AGs



Fuente : (K.F. Man and K.S. Tang, Article)

#### 2.3.4. Evolución del Genoma

Consiste en la replicación del genoma para que sea funcionalmente compatible en cuanto a amplitud, frecuencia, capacidad de respuesta, tiempo de establecimiento y otras características dinámicas propias del objeto de control. Las características estáticas aparecen representadas en el clon a través de los parámetros estructurales, dimensionales, de interconexión de las partes mecánicas, electrónicas, neumáticas, etc. (Muñoz y Pardo 2004).

En la presente investigación se proponen los Algoritmos Genéticos (AGs), para la aplicación e interpretación del mapeo genético, que contiene los códigos de la estructura funcional de la operación. Cada unidad operativa está formada por elementos unitarios que representan una parte de la operación del dispositivo lo que permitirá estudiar y optimizar la repercusión de cada variable en el desempeño del sistema.

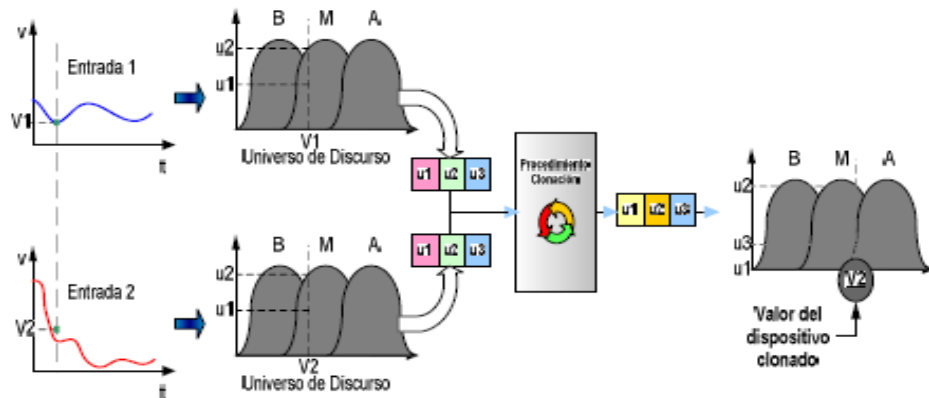
#### 2.3.5. Metodología basada Células madres

El dispositivo clonado, ya no precisa de una etapa de aprendizaje, está ya ha sido realizada en el procedimiento del AG (en la etapa de búsqueda de la correcta secuencia), por lo que se implementa directamente, reemplazando al dispositivo "padre", el cual se puede utilizar como elemento de referencia en una etapa primaria de implantación un resumen de la operación del sistema clonado, en esta ilustración se aprecia, como las entradas son convertidas, gracias al "Fuzzy c-mean" en clusters difusos y estos a su vez son reflejados en conjuntos difusos.

Luego de poseer esta información en forma de “cromosoma”, se aplica la secuencia de operadores genéticos, la cual convierte la información de entrada en “cromosomas” de salida con la misma estructura de datos (antecedentes y consecuentes).

El conjunto de datos entregado por el proceso de clonación, es procesado por el sistema, una de las etapas importantes de este proceso es la defusificación de una parte del “cromosoma”, de tal forma que podamos tener el valor de la variable clonada en rangos del universo de discurso y no en términos de pertenencia a conjuntos borrosos. Figura 11

Figura 11. Procedimientos de Clonación



Fuente: Muñoz Antonio F Nuevos métodos y procedimientos de alta precisión aplicado a pavimentos y vía certificado de registro de soporte lógico – software técnicas de inteligencia artificial basados en algoritmos genéticos para determinar el desempeño a partir de los parámetros de comportamiento Libro - Tomo – Partida 13-40-467 Fecha Registro 03-Feb-2014

El conjunto de datos entregado por el proceso de clonación, es procesado por el sistema, una de las etapas importantes de este proceso es la defuzzificación de una parte del “cromosoma”, de tal forma que podamos tener el valor de la variable clonada en rangos del universo de discurso y no en términos de pertenencia a conjuntos borrosos.

El modelo matricial de diseño de los circuitos a nanoescala incluye las matrices  $A_{ij}$  correspondientes a los datos de verificación del modelo donde las filas refieren las señales de salida y las columnas las señales de entrada.

$$A(i, j) = \sum_{i_{n-1}}^{2^{t_1}} \sum_{i_{n-2}}^{2^{t_2}} \dots \sum_{i_n}^{2^{t_{n-2}}} \sum_{i_1}^{2^{t_{n-1}}} A_n(i, i_1) \cdot A_{n-1}(i_1, i_2) \dots \cdot A_2(i_{n-2}, i_{n-1}) \cdot A_1(i_{n-1}, j) \quad (1)$$

$$\begin{aligned}
& P(X_n = x_n^i, X_0 = x_0^j) \\
&= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{n-2}, i_{n-1}} P(X_n = x_n^i, X_{n-1} = x_{n-1}^{i_1}, \dots, X_1 = x_1^{i_{n-1}}, X_0 = x_0^j) \\
&= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{n-2}, i_{n-1}} P(X_0 = x_0^j) \cdot P(X_1 = x_1^{i_{n-1}} | X_0 = x_0^j) \dots \\
& P(X_n = x_n^i | X_{n-1} = x_{n-1}^{i_1})
\end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned}
& A_k(i, j) = A_{k,1}(i_1, j_1) \cdot A_{k,2}(i_2, j_2) \dots A_{k,g_{k1}}(i_{g_{k1}}, j_{g_{k1}}) \\
&= p^u \cdot q^v
\end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned}
& P(X_k = x_k^i | X_{k-1} = x_{k-1}^{i_1}) \\
&= P(X_{K,1} = x_{k,1}^{i_1} | X_{k-1,1} = x_{k-1,1}^{j_1}) \cdot P(X_{K,2} = x_{k,2}^{i_2} | X_{k-1,2} = x_{k-1,2}^{j_2}) \\
& \dots P(X_{K,g_{k1}} = x_{k,g_{k1}}^{i_{g_{k1}}} | X_{k-1,g_{k1}} = x_{k-1,g_{k1}}^{j_{g_{k1}}})
\end{aligned}$$

Fuente: Huifei Rao, Jie Chen, Changhong Yu, Woon Tiong and others Ensemble Dependent Matrix Methodology for Probabilistic-Based Fault-tolerant Nanoscale Circuit Design

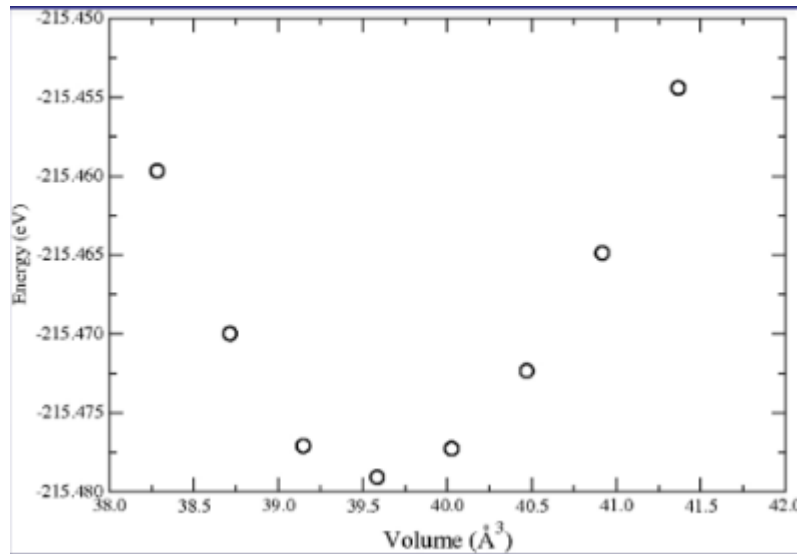
Se conoce para que un sistema dinámico es estable si su energía total decrece monótonamente hasta alcanzar un estado de equilibrio. Este concepto se extrapola a los sistemas borrosos y surge entonces la necesidad de determinar la forma de medir la energía de un sistema borroso. Los autores introducen la expresión de la energía E de un conjunto borroso X como

$$E(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(x_i) \cdot f(\mu_X(x_i))$$

donde

- x<sub>i</sub>: valor que define el punto del universo de X donde estamos,
- w: función que define la influencia sobre E de la posición de x<sub>i</sub>,
- f: función que define la influencia de parámetros de la función de pertenencia tales como valor máximo, forma, superficie, dispersión, etc. y
- n: Número de puntos (cardinales) de que consta el universo de X (se supone discreto).

Figura 12. Referentes de modelos basados en clusters difusos y la la energía de un sistema borroso



De modo análogo, ara una relación borrosa  $\mathbf{P}$ , tal que describa a un producto Cartesiano de  $X \times Y$  se define

$$E(\mathbf{P}) = \frac{1}{n \cdot m} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m w(x_i, y_j) \cdot f(\mu(x_i, y_j))$$

donde

w: función que da cuenta de la influencia de la posición del producto cartesiano,

f: función que da cuenta de la influencia de la función de pertenencia,

n y m: cardinales de los universos discretos X e Y.

Es bueno recordar que los estados, en un sistema físico estable, tienden a una posición en el espacio de estados, donde la energía sea mínima. Si la energía almacenada en el sistema es monótonamente decreciente con el tiempo, tras algún período, éste alcanzará un mínimo y el sistema es localmente estable. Tal punto de mínimo se conoce también como estable y se le identifica como de equilibrio. Por su parte si es el *promedio* de la energía el que decrece (no monótonamente), el sistema puede tener más estados de equilibrio.

Los conceptos de la energía de un sistema borroso son más generales que los de la energía en un estricto sentido físico, pues tienen en cuenta, como se vio, ciertas propiedades de las relaciones borrosas.

Se dice que un sistema borroso es inestable si la energía de la relación borrosa crece con el tiempo hasta un valor "infinito". Se dice que es oscilatorio si la energía de la relación borrosa fluctúa con el tiempo periódicamente.

En base del modelo y las definiciones precedentes tendríamos que la energía de un sistema borroso sería:

$$E(X_{k+1}) = E(X_k \circ P)$$

pero

$$X_1 = X_0 \circ P$$

$$X_2 = X_1 \circ P = X_0 \circ P^2$$

•

•

•

$$X_i = X_0 \circ P^i$$

•

•

Donde  $X_0$ : condición inicial borrosa y

$$P^i = P \circ P \circ \dots \circ P, i \text{ veces.}$$

La razón de cambio de la energía podría definirse entonces como

$$\Delta E = \frac{E(X_i) - E(X_{i-1})}{\Delta i} ; i = 1, 2, 3, \dots$$

donde  $\Delta i = 1$  es el intervalo de tiempo discreto. Entonces

$$\Delta E = E(X_0 \circ P^i) - E(X_0 \circ P^{i-1}) ; i = 1, 2, 3, \dots$$

Dado que, basados en las discusiones precedentes,  $E(X_0) = \text{const.}$ , puede concluirse que la razón de cambio de la energía del sistema borroso no depende de las condiciones iniciales.



A continuación algunos ejemplos de aplicación en nanoinstrumentación biomédica.

### Modelamiento fuzzy

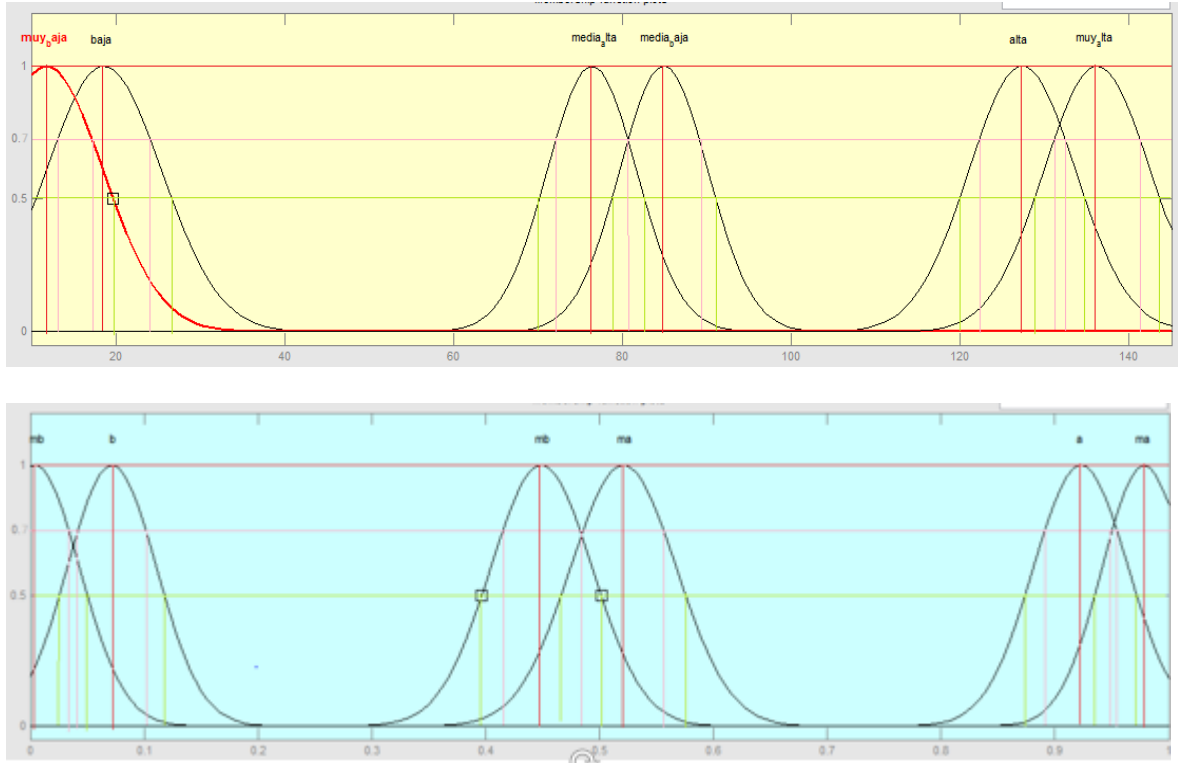


Tabla 3. DNA CODE nano sensor

VARIABLES	FUZZY SET	MEMBERSHIP( $\mu$ )		
		0,50	0,75	1
nano sensor	muy bajo	[0;20]	[0;14]	[5]
	bajo	[1;27]	[7;25]	[18]
	medio bajo	[70;82]	[73;80,5]	[77]
	medio alto	[79;91]	[81;90]	[85]
	alto	[120;136]	[123;132]	[128]
	muy alto	[129;143]	[131;141]	[137]

Tabla 4. DNA CODE nano actuador

VARIABLES	FUZZY SET	MEMBERSHIP( $\mu$ )		
		0,50	0,75	1
nano actuador	muy bajo	$\triangleright [0;0,04]$	$\triangleright [0;0,03]$	$\triangleright [0]$
	bajo	$\triangleright [0,02;0,12]$	$\triangleright [0,05;0,1]$	$\triangleright [0,08]$
	medio bajo	$\triangleright [0,4;0,5]$	$\triangleright [0,42;0,49]$	$\triangleright [0,45]$
	medio alto	$\triangleright [0,46;0,57]$	$\triangleright [0,48;0,56]$	$\triangleright [0,52]$
	alto	$\triangleright [0,87;0,96]$	$\triangleright [0,89;0,95]$	$\triangleright [0,93]$
	muy alto	$\triangleright [0,94;1,4]$	$\triangleright [0,95;1,3]$	$\triangleright [0,97]$

### 2.3.2. El electrospinning

El término electrospinning es reciente y deriva de spinning electroestático. Se hizo uso de él por primera vez en 1994, pero la idea científica es original de los años 30. La patente por el electrospinning se registró en el 1934 por Formhals. Se describía un dispositivo experimental para la producción de filamentos de polímero empleando un campo electrostático.

A lo largo de los últimos 20 años, pero más significativamente los últimos años se han dedicado más esfuerzos al electrospinning. Esta tendencia podría atribuirse al interés actual en las microfibras y nanofibras que se pueden obtener por este proceso.

Se han conseguido producir fibras finas para electrospinning a partir de más de cincuenta polímeros, entre disoluciones y polímeros fundidos. Esta cifra muestra el potencial que este proceso está generando. Aun así, la comprensión de los fundamentos del proceso es aún muy prematura y la literatura relativa a la física del proceso de electrospinning es limitada.

#### 2.3.2.1. Descripción de la técnica de electrospinning

Un campo electrostático lo suficientemente fuerte, es aplicado entre dos polos opuestos, conformados por una aguja o sistema de inyección y una placa metálica o colector, (el cual está a potencial 0), donde se depositan las fibras nanométricas formando un tejido con textura, color, y densidad características.

La disolución del polímero previamente preparada, se carga en una jeringa de inyecciones que, mediante un tubo de plástico inerte, se conecta a una aguja. Una

bomba de infusión o perfusión unida al émbolo de la jeringuilla genera una presión y un flujo constante que a través del tubo se trasmite a la disolución del polímero en la aguja. Por el efecto de la polarización y la carga originadas por el campo eléctrico, la solución es arrojada en forma de jet hacia una superficie conductora conectado con tierra (por lo general una pantalla metálica) a una distancia entre los 5 y 30cm del cono o aguja. Durante la creación del jet, el solvente gradualmente se evapora, y el producto obtenido se deposita en forma de manta de fibra no-tejida compuesta de nano fibras con diámetros entre 50 nm y 10  $\mu$ m. En el flujo electro-hidrodinámico del jet, las cargas son inducidas en el fluido a través de la distancia de separación de los electrodos (punta de aguja y colector metálico), rompiéndose la tensión superficial a través del campo eléctrico y descomponiéndose en una tangencial (t) y una normal (n), formando el cono de Taylor.

A medida que el jet adquiere una aceleración significativa, su diámetro disminuye en magnitud; finalmente el jet se solidifica convirtiéndose en una fibra de medidas nanométricas y presentándose una corriente del orden de micro Amperios sobre el jet.

La corriente sobre el jet proporciona la información sobre la densidad de la superficie de carga, que es un parámetro importante en el momento de determinar la estabilidad del jet.

La gota líquida está sujeta el extremo de la aguja por su tensión superficial hasta que la repulsión mutua de las cargas en la superficie de la gota es más fuerte y provoca una fuerza en sentido contrario a la contracción de la gota. La superficie de la gota sufre progresivamente el efecto de esta fuerza hasta que comienza a alargarse y a formar un cono inverso, llamado cono de Taylor. El proceso de elongación llega a un límite en el que la concentración de la carga es tan elevada que sobrepasa a la tensión superficial y da lugar a un haz en la punta del cono. El haz recorre varias trayectorias inestables durante las cuales se alarga, reduce su diámetro y pierde todo el disolvente (o se solidifica).

#### 2.3.2.1. Parámetros del proceso de electrospinning

Una de las principales variables cuantificables del proceso electrospinning es el diámetro de las fibras. Esta variable depende en su mayor parte del tamaño del haz y de la concentración de polímero que éste contenga. Según los fundamentos físicos publicados sobre el electrospinning, no hay un consenso total del proceso que el haz sufre en el recorrido entre la punta y el colector. Puede ser o no, que el haz se divida en más haces y que estos resulten en diferentes diámetros de fibras. En el caso de que no haya esta partición, la viscosidad se convierte en una de las variables más determinantes para el diámetro de las fibras.

Cuando los polímeros se disuelven, la viscosidad de la disolución es proporcional a la concentración de polímero. Por tanto, cuanto más alta sea la concentración, mayor será el diámetro de las fibras resultantes. El voltaje también es un parámetro respecto al cual el diámetro de las fibras es directamente proporcional, debido a que generalmente hay más disolución en el haz.

Las fibras producidas por electrospinning, a menudo, presentan defectos como son los poros y las aglomeraciones. La literatura indica que la concentración de polímero afecta la formación de aglomeraciones de tal manera que cuanto más concentrada en polímero sea la disolución para electrospinning, menos aglomeraciones presentarán las fibras. Algunas investigaciones han desarrollado ideas de los parámetros de los cuales depende la formación de aglomeraciones.

Algunos investigadores atribuyen el hecho de que no se formen aglomeraciones a la baja tensión superficial. Otros relacionan la baja concentración superficial en la concentración de polímero. Cabe destacar que la tensión superficial varía en función del disolvente y por este motivo el electrospinning no siempre es óptimo a tensiones superficiales bajas.

### **Diseño de los circuitos a nanoescala**

Como la industria de semiconductores contempla el final de la Ley de Moore, ha habido un interés considerable en materiales y dispositivos nuevos. Tecnologías tales como interruptores moleculares y matrices de nanocables de carbono ofrecen una ruta de acceso para la ampliación más allá de los límites de las CMOS convencionales. La mayoría de estas tecnologías están en las fases de exploración, todavía a años o décadas desde el momento en que van a ser actualizadas. De acuerdo con ello, el desarrollo de herramientas y técnicas de software para la síntesis de la lógica sigue siendo especulativa.

Sin embargo, para algunos tipos de las nuevas tecnologías, podemos identificar los rasgos generales que probablemente incidirá sobre la síntesis. Por ejemplo, las matrices de nanocables son diseñadas en manojos firmemente campales. Por consiguiente, muestran lo siguiente:

1. Un alto grado de paralelismo
2. Control mínimo durante el montaje
3. Aleatoriedad inherente a los esquemas de interconexión
4. Las altas tasas de defectos

Las estrategias existentes para la síntesis de la lógica de matrices de nanocables se basan de esquemas de encaminamiento similares a los utilizados para arreglos

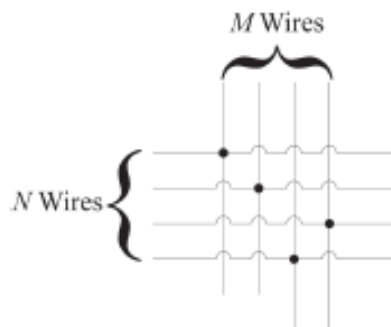
de compuertas programables en el campo. Estos se basan en la evaluación y programación interconectadas del circuito después de la fabricación.

Se describe un método general para la síntesis de la lógica que explota tanto el paralelismo y los efectos aleatorios del auto-ensamblaje, obviando la necesidad de dicha configuración posterior a la fabricación. Éste enfoque se basa en el cálculo con flujos de bits paralelos. Los circuitos se sintetizan a través de la descomposición funcional, con estructuras de datos simbólicos llamados diagramas multiplicativos de momento binario. La síntesis produce diseños con componentes paralelos aleatoriamente - y las operaciones AND y multiplexación - que operan en los flujos de bits. Estos componentes son fácilmente implementados en matrices de nanocables travesaños. Se presentan los resultados de la síntesis de los puntos de referencia de los circuitos que ilustran los métodos. Los resultados muestran que la técnica es eficaz en diseños con matrices de nanohilos de aplicación, con un equilibrio medido entre el grado de redundancia y la precisión de la computación.

### Modelo del circuito

La discusión de la síntesis se enmarca en términos de un modelo conceptual para las matrices de nanocables. Las conexiones entre los alambres horizontales y los verticales son al azar. Sin embargo, se supone que estas conexiones son casi de uno a uno, es decir, casi todos los hilos horizontales se conecta a exactamente a un hilo vertical, y viceversa. Este es un atributo específico de tipos de matrices de nanocables, controladas durante el autoensamblaje.

Figura 13. . Nanohilos cruzados con conexiones randómicas.



Fuente Weikang Q, Jhon Backes, Marc Riedel. 2011

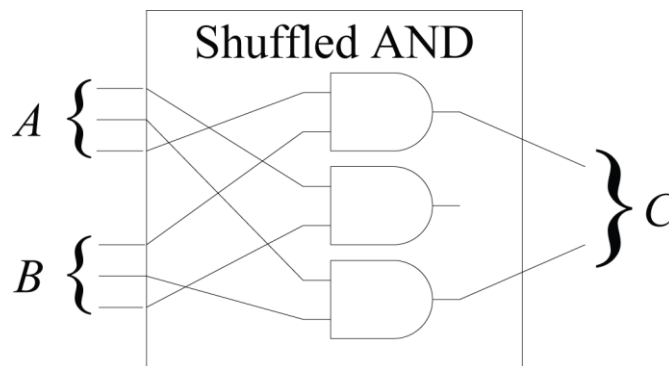
## Flujos de bits paralelos

El método de síntesis implementa computación digital en forma de flujos de bits paralelos. Se refiere a un conjunto de nanocables paralelos como un paquete. El ancho del paquete es equivalente a la cantidad de nanocables. Su peso actual es el número de unos (1) lógicos en sus cables. La señal que lleva es un valor real entre cero y uno correspondiente al peso fraccional: para un haz de alambres de  $N$  cables, si  $k$  de los cables es 1, entonces la señal es  $k/N$ . Entonces  $P(X=1)$  denota la probabilidad de que cualquier cable dado en paquete  $X$  lleva un 1.

## Dispositivos aleatorios

Se implementa la computación con dos construcciones básicas de nanocables: AND's aleatorias y Agrupación de plexores. Se describen estos sólo en términos conceptuales.

Figura 14. Un dispositivo AND aleatorio para paquetes con un ancho de 3



Fuente Weikang Q, Jhon Backes, Marc Riedel. 2011

## Mezcla de AND aleatorio

Una mezcla AND tiene dos haces de cables  $N$  como entradas y un haz de cable  $N$  como la salida. Cada alambre en el haz de salida es en realidad la salida de una compuerta AND, que tiene una entrada desde el primer haz de entrada y el otro de la segunda. La elección de qué entradas se introducen en la compuerta AND es aleatoria. La Imagen 4-8 muestra una mezcla de AND con  $N = 3$ .

Se supone que la señal transportada por el primer haz de entrada  $A$  es  $\alpha$ , que llevado por el segundo haz de entrada  $B$  es  $b$ , y que llevado por el haz de salida  $C$

es  $c$ . A condición de que los bits en el primer y segundo haz de entrada son independientes, para un gran  $N$  se puede suponer que

$$c = P(C = 1) \tag{1}$$

$$c = P(A = 1 \text{ and } B = 1) \tag{2}$$

$$c = P(A = 1) \cdot P(B = 1) \tag{3}$$

$$c = a \cdot b. \tag{4}$$

Se ve que la mezcla AND en efecto realiza la multiplicación de las señales transportadas por los dos haces de entrada.

### Agrupación de plexores

Una agrupación de plexores tiene dos haces de cables  $N$  como sus entradas y un haz de cables  $N$  como su salida. Está marcado con una razón de selección fija,  $0 < s < 1$ . El haz de salida se compone de una selección aleatoria de bits de  $sN$  desde el primer haz de entrada y los bits  $(1-s)N$  de la segunda. La elección no se ordena: más bien, se produce una redistribución aleatoria. La figura 4-9. muestra una agrupación de plexores con  $N=4$  y  $s=3/4$ . El haz de salida tiene 3 cables desde el haz de entrada A y un cable desde el haz de entrada B.

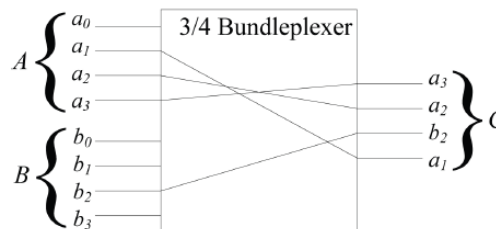
Se supone que la señal llevada desde la primer entrada del haz A es  $a$ , la realizada por la segunda entrada del haz B es  $b$  y que llevado por el haz de salida C es  $c$ . Para un largo  $N$ , se puede asumir que

$$c = P(C = 1) \tag{5}$$

$$c = sP(A = 1) + (1 - s)P(B = 1) \tag{6}$$

$$c = sa + (1 - s)b. \tag{7}$$

Figura 15. Agrupación de plexores con  $N=4$  y  $s=3/4$



Fuente Weikang Q, Jhon Backes, Marc Riedel. 2011

Se observa que la agrupación de plexores en efecto realiza una adición escalada dentro de las señales transmitidas por los dos haces de entrada.

## Diseño de circuitos

El método de síntesis produce un diseño de circuito que opera sobre los valores fraccionarios ponderados realizados por los haces de cables. El enfoque es análogo a la formulación de una representación polinómica de valor real de un circuito, con la multiplicación aritmética y la adición. (En efecto se realiza la síntesis con datos estructurados llamados diagramas de momento binario.)

Por ejemplo, considere un circuito con una tabla de la verdad booleana que muestra en la parte superior derecha de la 4-10. Su salida  $y$  se puede representar como

$$y = a + b - 2ab$$

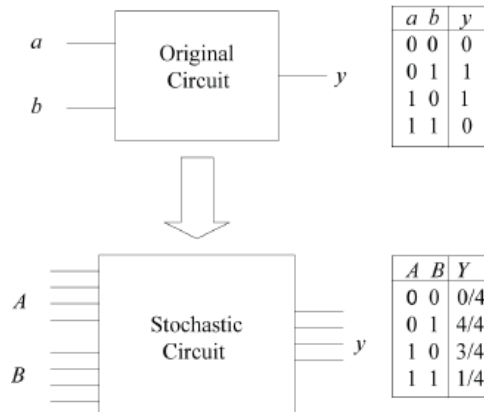
La evaluación de este polinomio para todos los valores booleanos de  $a$  y  $b$  da la correcta salida  $Y$  booleana. Se utiliza una mezcla de AND para la multiplicación y una agrupación de plexores para la adición.

Para un circuito con  $m$  entradas y  $n$  salidas, se tienen paquetes de haces de entrada  $M$  y  $N$  haces de salida (cada paquete que consiste en  $N$  cables paralelos). Para el cálculo, todos los cables en cada paquete de entrada se establecen en el valor de entrada booleana correspondiente (por lo que todos los cables de cada haz se establecen en 0 o 1). Con agrupación de plexores, los cables son seleccionados al azar a partir de los paquetes separados. Como resultado, los haces internos llevan flujos de bits aleatorios con coeficientes fraccionarios.

Se asume que la salida del circuito es directamente usado en la forma fraccional ponderada. Por ejemplo, en aplicaciones de sensores, un voltaje análogo podría ser utilizado para transformar un haz de salida de bits en un valor booleano. Se supone una cuantificación directa: una señal de salida mayor que o igual a 0,5 corresponde a 1 lógico; menos que esto corresponde a 0.

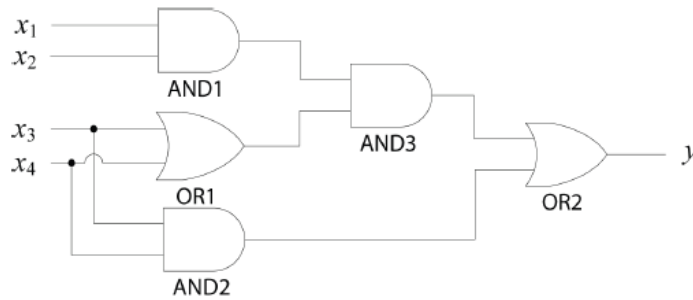


Figura 16. Un ejemplo de la formulación de un diseño de circuito.



Fuente Weikang Q, Jhon Backes, Marc Riedel. 2011

Figura 17. Un circuito simple.



Fuente Weikang Q, Jhon Backes, Marc Riedel. 2011

La figura 17 ilustra la formulación. Se usan los haces con un ancho de  $N=4$ . La tabla de la verdad muestra en la parte inferior derecha el peso fraccional en los haces de salida  $Y$ . Para las entrada  $A=1$  y  $B=0$ , se tiene que  $Y=3/4$ , el cual corresponde a un 1 lógico. Para  $A=1$  y  $B=1$ , se tiene  $Y=1/4$ , el cual corresponde a un 0 lógico. Entonces, el diseño del circuito implementa la misma función booleana como se muestra en la parte superior derecha de la tabla de la verdad.

## Dualidad onda partícula

De acuerdo con la teoría clásica de la luz, ésta es una radiación electromagnética que se propaga por el espacio de forma ondulatoria, por lo que se pueden estudiar los fenómenos que competen a la física óptica, como la dispersión, difracción, interferencia, etc. Sin embargo, existen dos fenómenos que necesitaban incorporar nuevos conceptos para poder darles una explicación: la radiación de cuerpo negro, estudiado por Max Planck y el efecto fotoeléctrico por A. Einstein. Ambos científicos mostraron que estos fenómenos se podían explicar fácilmente si se supone que la energía de la luz se halla concentrada en paquetes discretos de energía que fueron llamados cuantos.

La energía que está contenida en un cuanto está definida por la fórmula:

$$E = h\nu \quad (12)$$

Donde  $\nu$  es la frecuencia y  $h$  es la constante de Planck, cuyo valor numérico es:

$$h = 6.626075 \times 10^{-34} \text{ j.s}$$

Los cuantos poseen una cantidad de movimiento  $P$  (el cual es definido en mecánica clásica como el producto de la masa por la velocidad).

$$P = \hbar k \quad (13)$$

Pero

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

y  $k$  es el número de onda:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{k}$$

Entonces

$$P = \frac{\hbar}{\lambda} \quad (14)$$

Que define el momento de un cuanto.

## Estados cuánticos

De acuerdo a la teoría de Planck, él estableció que las moléculas solo pueden tener valores discretos de energía  $E_n$  dados por la ecuación:

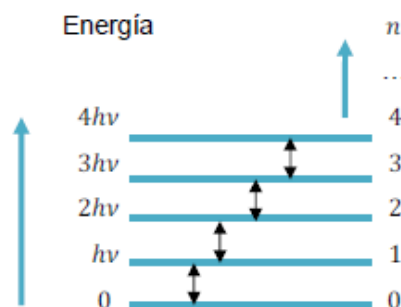
$$E_n = nhv$$

(15)

Donde  $n$  es un entero positivo denominado número cuántico. Debido a que la energía de la molécula solo puede tener valores discretos se dice que la energía está cuantizada. Cada valor de energía es un estado cuántico diferente.

Además se introdujo el concepto en el que explica que las moléculas emiten o absorben fotones pasando de un estado cuántico a otro, como se muestra en la siguiente figura.

Figura 18. Estados cuánticos



Fuente Ballardó, I. 2010

## Comunicación y computación cuántica

### Comunicaciones cuánticas

Desde el surgimiento de las comunicaciones analógicas y la posterior incorporación de las comunicaciones digitales a éstas, el principal objetivo es que deben disponer de esquemas que ofrezcan transmisiones seguras y eficientes. En la búsqueda de estos objetivos se ha tenido que recurrir a ciencias como la informática, las telecomunicaciones, la mecánica cuántica, etcétera, con el fin de integrar nuevas ramas para el surgimiento de las comunicaciones cuánticas.

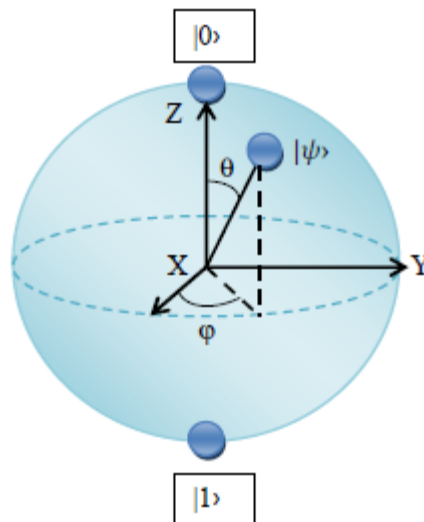
El esquema básico de las comunicaciones cuánticas se basa en el entrelazamiento entre un par de partículas. Al principio dicho entrelazamiento solo era visto como una propiedad muy fina de la mecánica cuántica, pero recientemente la información cuántica ha demostrado la tremenda importancia de esta propiedad para la formulación de nuevos métodos de transmisión y algoritmos de información.

## Esfera de Bloch

La esfera de Bloch (figura 19) constituye una manera de visualizar y representar geoméricamente el estado de un qubit simple. De acuerdo con esta perspectiva, el vector  $|0\rangle$  corresponde al polo norte de dicha esfera mientras que el vector  $|1\rangle$  se ubica en el polo sur, es decir, como si se tuviera un 0 o un 1 lógico.

Si se elige un fotón, los vectores  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$  pueden representar una de dos posibles polarizaciones. También se puede elegir el electrón de un átomo para representar uno de dos posibles valores de energía: su estado base (es la energía más baja posible) y un estado excitado (cualquier otro valor de energía). Esto semejando un giro en el spin del electrón ya sea dirigido al polo norte o polo sur y de igual forma se obtendría uno de los valores del qubit,  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$ .

Figura 19. Representación de un qubit por medio de la esfera de Bloch.



Fuente Ballardó, I. 2010

Un uso que se da a la esfera de Bloch es mediante las compuertas cuánticas. La compuerta Hadamard es una de las compuertas que más se utiliza. Ejemplificando con la figura anterior, el cambio en la salida de un qubit simple corresponde en la compuerta a la rotación y reflexión de la esfera. La operación Hadamard es sólo una rotación sobre el eje Y con un ángulo de  $90^\circ$  y la reflexión se dará sobre el plano X-Y.

Las compuertas lógicas pueden implementar una excitación del electrón con una exposición de luz con ciertas longitudes de onda que lo coloquen en su estado base o estado de excitación, con ello lograr un giro en su spin y que obtenga uno de los dos estados  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$ , posibles, se puede representar por medio de la esfera de Bloch el giro que realizaría y estado que tomaría.

### Qubits

Los qubits son el elemento fundamental para el tratamiento de la información cuántica. Sus propiedades son independientes de como sea tratado, ya sea con el spin de un núcleo o de la polarización de un fotón. Los dos estados básicos de un qubit son  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$  además el qubit se puede encontrar en un estado de superposición para producir diferentes estados cuánticos. Dicha superposición de estados se representa como:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (16)$$

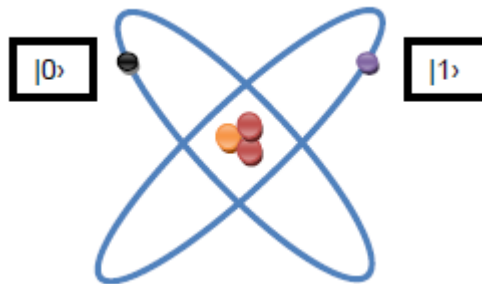
Donde  $\alpha$  y  $\beta$  son números complejos. Dicha expresión cumple con las propiedades probabilísticas tratadas en el apartado de estados cuánticos mencionados anteriormente.

$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ , indica que el qubit es un estado entrelazado o que está en superposición. La ecuación indica que esta superposición de estados genera la función de onda que permitirá conocer la probabilidad de hallar una partícula en el espacio.

Un qubit puede existir en un estado continuo entre  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$  hasta ser medidos, una vez medidos se tiene un resultado probabilístico.

En el modelo atómico (figura 4-26), el electrón puede existir en cualquier de los dos estados llamados “tierra” o “excitado” y que corresponden a  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$  respectivamente. Lo anterior se puede hacer incidiendo luz sobre el átomo con una energía apropiada y con una duración apropiada de tiempo, es posible mover un electrón del estado  $|0\rangle$  al estado  $|1\rangle$  y viceversa.

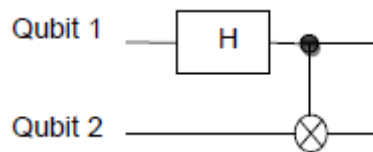
Figura 20. Representación de un qubit por dos niveles electrónicos en un átomo



## Estados de Bell

Los estados de Bell juegan un papel clave dentro de la ciencia de la información cuántica, pues representan los posibles estados de un entrelazamiento, es decir, el estado cuántico de dos qubits.

La creación de estos estados se puede dar por medio de la utilización de una compuerta Hadamard y una CNOT, que en conjunto conforman el siguiente circuito:



Para demostrar la obtención del primer estado se introducirán los qubits  $|0\rangle$  ó  $|1\rangle$  en su entrada respectiva; al entrar el qubit  $|0\rangle$  a la compuerta Hadamard, se obtiene:

$$\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (17)$$

Y al entrar en acción el segundo  $|0\rangle$  se obtiene:

$$\frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad (18)$$

Ahora que ya se tiene este estado, la compuerta CNOT dará como resultado lo siguiente:

$$|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (19)$$

El cual ya es definido como un estado de Bell. Si se establece una tabla de verdad, ésta será:

Tabla 5. Estados de Bell que representan el entrelazamiento de dos qubits

Entrada	Salida (Estado de Bell)
$ 00\rangle$	$ \beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( 00\rangle +  11\rangle)$
$ 01\rangle$	$ \beta_{01}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( 01\rangle +  10\rangle)$
$ 10\rangle$	$ \beta_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( 00\rangle -  11\rangle)$
$ 11\rangle$	$ \beta_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}( 01\rangle -  10\rangle)$

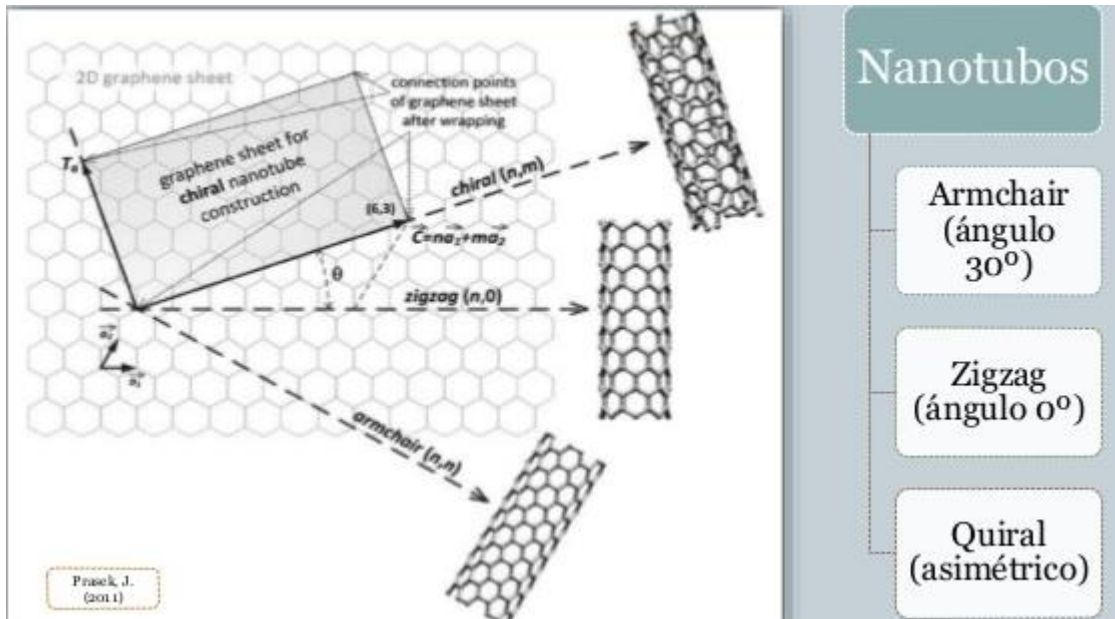
2.3.3. Ecuaciones que rigen el comportamiento de los sistemas nanotecnológicos basados en la teoría cuántica

### Dispositivos nanotubos de carbono

A continuación se describe los elementos basados en nanotubos de carbón

#### Estructura de la banda

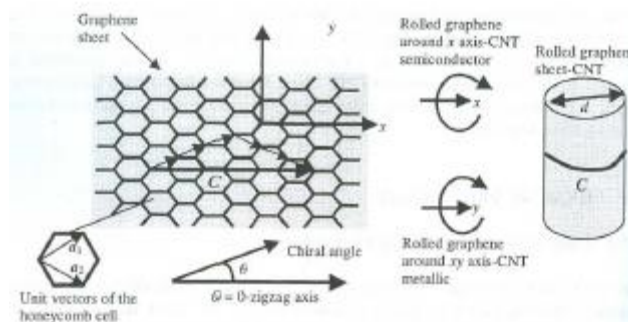
Los CNT (nanotubos de carbón), así como los dispositivos electrónicos, ópticos y NEMS (sistemas nano electro mecánicos) basados en ellos, representan uno de los tópicos de mayor investigación en la nanoelectrónica moderna. Teóricamente, los procesos tecnológicos experimentales avanzados involucrados en el estudio de las propiedades de CNT y sus aplicaciones. Los CNT tienen una serie de sorprendentes características eléctricas, térmicas, ópticas y mecánicas que no se encuentran en otros materiales o prevalecen por encima de cualquier material existente con características similares con poco orden de magnitud. Estas propiedades justifican el gran interés en los dispositivos de CNT.



Fuente: <https://www.slideshare.net/EnriqueCastaos3/nanotubos-carbono>

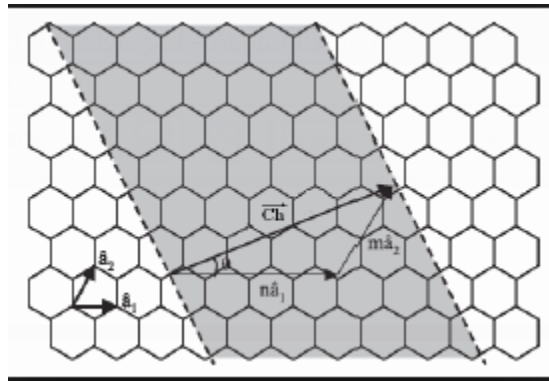
Los CNT son cilindros vacíos que pueden ser considerados como hojas enrolladas unas encima de otras formando capas concéntricas de grafeno. El grafeno es una estructura en 2D de estructura tipo panal de abeja formado por átomos de carbono. El CNT de una sola capa de grafeno se llama CNT de pared simple (SWCNT), denomina CNT multicapas (MWCNT). Muy a menudo las propiedades físicas de SWCNT difieren significativamente de aquellos de MWCNT, y por tanto debe tenerse cuidado al escoger el tipo de CNT involucrado para una cierta aplicación.

Figura 21. Descripción esquemática de la estructura del CNT





Dependiendo de cómo estén enrolladas las capas de grafeno, podemos conseguir CNT con una conducción metálica o semiconductora, este se puede observar en la siguiente gráfica si el giro es entorno al eje x es un CNT semiconductor, si el giro es entorno al eje y el CNT es metálico. Esta posibilidad notable de enrollarse en cualquier dirección (sea x o y), es única para cualquier material conocido. La manera en que una hoja se pliega se describe por dos parámetros: chiralidad o vector C chiral (característica de un cristal o molécula que no puede ser súper impuesta a su imagen reflejada) y el ángulo chiral (teta). El vector chiral de un CNT, el cuál uno de dos sitios cristalográficos equivalentes está dado por



Fuente: <http://www.monografias.com/trabajos93/estado-del-arte-nanotubos-carbono/estado-del-arte-nanotubos-carbono.html>

$$C = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (20)$$

Y los “a” son vectores unitarios (de las paredes de las celdas) de la celosía del grafeno. Y los números n y m son enteros.

El par de números enteros (n,m) describen completamente el carácter metálico o semiconductor de cualquier CNT. En general, un CNT es metálico si n=m, se transforman en semimetálicos sin n no es igual a m en la ecuación anterior. En la mayoría de investigaciones se encontraron (n,m) CNT metálicos los también llamados armchair CNTs (brazos de silla), y los CNTs caracterizados por (n,0), los cuales son semiconductores y se los denomina CNT zigzag. Hay un vínculo directo entre el par (n,m) y las características geométricas del CNT.

En particular el diámetro CNT está dado por:

$$d = \frac{a_{c-c} [3(m^2 + mn + n^2)]^{1/2}}{\pi} = \frac{|C|}{\pi}$$

(21)

Donde  $a_{c-c} = 1.42$ . A que es la longitud del enlace del carbono, y  $|C|$  es la magnitud del vector chiral. La fórmula anterior ilustra la importancia del vector chiral: su módulo es igual a la circunferencia del CNT. El ángulo chiral se define por:

$$\theta = \tan^{-1} \left[ \sqrt{\frac{3n}{2m+n}} \right]$$

(22)

Donde el valor  $\theta = 30^\circ$  para (n,n=m) CNT armchair y es igual a  $\theta = 60^\circ$  para (n,0) CNT zigzag. Es común sin embargo limitar el dominio de  $\theta$  al rango (entre 0 y  $30^\circ$ ); entonces como se muestra en la siguiente figura, debido a la simetría, se asigna  $\theta = 0^\circ$  para los CNT zigzag y se considera  $\theta = 0^\circ$  como el eje referencial o el eje zigzag. En lugar del vector chiral y del ángulo chiral, el par de enteros (n,m) por ejemplo (10,10), (9,0) o (4,2), pueden ser usados alternativamente para especificar un CN, el diámetro y ángulo chiral de éstos pueden calcularse usando las dos ecuaciones anteriores.

La amplitud de banda del semiconductor CNT está dado por:

$$E_g = \frac{4\hbar v_F}{3d}$$

(23)

Dónde:

$E_g$  = energía del bandgap

$\hbar$  = constante de Planck

$d$  = diámetro del nanotubo

$v_F$  = velocidad de Fermi

Y toma el valor

$$E_g (\text{eV}) \cong \frac{0.9}{d(\text{nm})}$$

(24)

Para la velocidad de Fermi  $v_F = 8 \times 10^7$  m/s.

Porque los SWCNT tienen diámetros que van de una fracción de nanómetro a varios nanómetros. Los semiconductores CNT tienen una amplitud de banda (bandgap) en el rango de 20 meV a 2 eV. En Bandgap (amplitud de banda) diseñado se logra en el caso del CNT simplemente cambiando el diámetro del nanotubo.

Cambiando las propiedades físicas de los CNT se puede incluir nuevas propiedades en los dispositivos CNT. Si en el CNT cristalino se introducen defectos en la estructura cristalina, como consecuencia se produce un cambio significativo del bandgap, los CNT pueden ser mejorados de muchas maneras que incluyen el dopado, absorción de átomos individuales o moléculas (hidrogenación, oxigenación), por deformaciones mecánicas radiales, y por la aplicación de campos eléctricos o magnéticos.

Independiente del método de mejoramiento se modifica profundamente la estructura de la banda de energía del CNT. En particular, una transformación reversible semiconductor-aislante ocurre en algunos casos, lo que cambia completamente las propiedades del material de CNT o de un arreglo de CNT (MWNT), con consecuencias importantes en los dispositivos basados en CNT.

## Propiedades eléctricas de los CNT

La siguiente tabla representa las propiedades físicas de los nanotubos de carbón.

Tabla 6. Propiedades físicas de los nanotubos de carbón

PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS NANOTUBOS DE CARBÓN		
Parámetro	Valor y unidad	Observación
Unidad de longitud del vector	$A = 3a_{c-c} = 2.49 \text{ \AA}$	$a_{c-c} = 1.44 \text{ \AA}$ es la longitud del carbón
Densidad de corriente	$> 10^9 \text{ A/cm}^2$	1000 veces menor que la corriente en el cobre Mediciones
Conductibilidad termal	6600W/Mk	Mayor conducción termal que cristalización
Módulo de Young	1Tpa	Una resistencia de material mucho más fuerte que el acero
Movilidad	10000 a 500000 $\text{cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$	La simulación indica mayores a $100000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ S}^{-1}$
Camino libre promedio (transporte Balístico)	300-700nm semiconductor CNT 1000-3000 nm metálicos CNT	Mediciones a temperature ambiente
Conductancia en el transporte Balístico	$G = \frac{4e^2}{h} = 155 \mu\text{S}$ $\frac{1}{G} = 6.5 \text{ k}\Omega$	Es tres veces mejor que la estructura de un semiconductor
Parámetro Luttinger g	0.22	Los electrones son correlacionados CNTs
Momento orbital magnético	$0.7 \text{ meV}^{-1} (d = 2.6 \text{ nm})$ $1.5 \text{ meV}^{-1} (d = 5 \text{ nm})$	El momento orbital magnético depende del diámetro del nanotubo

## EL TRANSISTOR CNT

Casi todos los transistores CNT son del tipo FET (los transistores de efecto de campo), con configuraciones diferentes. El desarrollo de los transistores de CNT (CNTFET) es un área reciente de investigación, mucho esfuerzo es invertido por muchas compañías para las aplicaciones de los CNTFET fiables y de circuitos integrados basados en ellos. La razón es que recientes configuraciones de CNTFET, como MOSFET CNTFET, a una temperatura ambiente trabajan 20 veces más rápido que el mejor transistor de óxido metálico complementario (CMOS). Se debe reemplazar al CMOS el cual es utilizado en las modernas computadoras, sistemas de comunicación, o dispositivos electrónicos. Así, debido al mejor desempeño de transistores CNTFET, se espera que la tecnología del carbón, en el futuro, reemplace mundialmente la tecnología del CMOS con base en el silicio. Aunque el diseño y la aplicación tecnológica de los CNTFET están en sus inicios, el progreso de estos elementos es sumamente rápido. El primero CNTFET, tiene una base de Si dopado encima de esta, se encuentra una capa de  $\text{SiO}_2$  delgada, sobre esta el semiconductor CNT con un diámetro de unos  $n$ , (con un bandgap de  $0.6 - 0.8$  eV) terminado por dos electrodos metálicos (oro) con un espesor de 100-300 nm.

El funcionamiento de este CNTFET es análogo al transistor MOSFET tipo p. este primero transistor rudimentario tipo FET basado en CNT simplemente consiste en un semiconductor SWCNT ligado a dos electrodos metálicos depositados en una fina capa de dióxido de silicio, todo este sustrato, se deposita en una capa de silicio dopado, que actúa como compuerta (gate). Cuando el voltaje de compuerta (gate) es negativo, la corriente fuente-drenaje es casi constante, la saturación indica que la resistencia del contacto de los dos electrodos prevalece por encima de la resistencia del CNT que depende del voltaje de compuerta (gate). Prácticamente para  $V_g = 0$  el CNTFET está en el estado ON y la energía Fermi se localiza cerca de la banda de la valencia, si la longitud de enlace de banda es comparable a la longitud  $L$  del CNT, y si la distancia de la compuerta (gate) CNT es más corta que la distancia entre los dos electrodos, una barrera se levanta en el medio del CNT para los voltajes de compuerta (gate) positivos.

Sin embargo, un par de años más tarde se evidenció un transporte balístico a temperatura ambiente en los transistores de CNTFET con un desempeño mejorado, basado en nanotubos de mejor calidad con baja resistencia en los contactos.

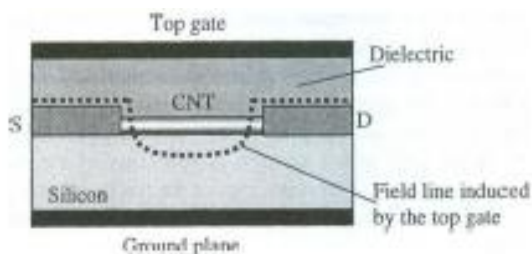
El TUBFET es un dispositivo que tiene los electrodos de Pt (platino) con un bandgap de 5.7 eV que es más grande que la bandgap del CNT, para que los portadores sean inyectados en el CNT mediante un túnel. Una capa de polarización forma en el electrodo-CNT una interfaz hasta que la banda de valencia se alinee al nivel de la energía de Fermi del electrodo metálico, produciendo barreras poco profundas para los agujeros incluso cuando ningún voltaje de compuerta (gate) es aplicado. La altura de estas barreras que son causadas por la diferencia en el bandgap entre los CNT y los electrodos, es

controlado por el voltaje de compuerta (gate) aplicado como sigue: para  $V_g < 0$ , la banda de valencia se divide para dos y se aplana hasta que se dpe lugar el aumento de la conductividad como en un metal (p.e., a un valor constante de conductancia), y para  $V_g > 0$ , la banda de valencia se dobla hacia abajo y la altura de la barrera para los agujeros aumenta, suprimiendo el transporte en el agujero entre los dos electrodos.

Es interesante notar que el TUBFET es aún un transistor FET rudimentario tiene un tiempo transversal de solo 0.1 ps que corresponden a 10 THz. Para un CNT con una capacitancia de aproximadamente 1nF, el tiempo de RC resultante es 100GHz cuando R (la resistencia en la compuerta del TUBFET) es del orden de 1-2 MΩ. sin embargo, la resistencia R es aproximadamente 10 kΩ para CNTFET con contactos de Pd (paladio) muestran el transporte balístico a la temperatura ambiente, la frecuencia de trabajo es de aproximadamente 10THz. La ganancia del TUBFET es de aproximadamente 0.35 pero puede aumentar más allá de 1 reduciendo la capa de dióxido de silicio.

Al contrario de los transistores anteriores que tienen un transporte difusivo (por difusión) el transistor CNTFET con contactos de paladio muestra un transporte balístico a temperatura ambiente. La conductancia en el estado de encendido (ON) tiene como límite balístico  $4e^2/h$  (e es la energía del electrón y h es la constante de Planck) a temperatura ambiente, similar a los nanotubos metálicos óhmicos. La explicación reside en la supresión de la barrera de Schottky en la interfaz metal-CNT, porque el paladio tiene una función de trabajo alta y una interacción moderada con el CNT. Los portadores libremente inyectados en la banda de valencia del semiconductor CNT están caracterizados por una conductancia G, la cual logra en el estado de conducción.

Otro tipo de transistor de CNT, desplegado en la siguiente figura es el transistor de barrera Schottky (SB-CNTFET) que consisten en un nanotubo empotrado en una capa dieléctrica que se crea entre la compuerta (gate) y la tierra y es terminado con dos electrodos de metal que actúan como la fuente y el drenaje. Al contrario de las configuraciones anteriores, donde la acción del transistor se produce variando la conductancia del canal, en el SB-CNTFET, esta acción es causada por las variaciones en la resistencia del contacto. El cambio se controla mediante un túnel que altera el voltaje en la compuerta superior (top gate).



**Figura Representación esquemática de un SB-CNTFET**

La conductancia del SB-CNTFET con finas capas de óxido en la compuerta gate sugiere una conducción bipolar en contraste con todos los transistores CNT estudiados hasta ahora, donde la conductancia es unipolar.

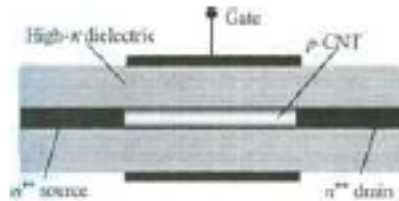


Figura. Esquema representativo del MOSFET - CNT.

Un transistor muy prometedor que imita un MOSFET normal tiene la fuente sumamente dopada y la región del emisor sin compuertas. Este MOSFET-CNT, representado en la anterior figura, trabaja bajo el mismo principio que el SB-CNTFET, denominado modulación de altura de barrera a través del voltaje de compuerta (gate). Sin embargo, el carácter bipolar de la conducción, específico al Sb-CNTFET, no existe en el MOSFET-CNT debido al apto dopado de la fuente y el emisor, y la barrera Schottky entre la fuente y el canal ya no existe. Esto, porque en el estado encendido (ON) el MOSFET-CNT trabaja como un SB-CNTFET pero con un voltaje cero o incluso con un voltaje negativo, la corriente en estado encendido (ON) aumenta. En el estado apagado (OFF) en el MOSFET -CNT aún tiene una fuga de corriente, pero es controlable el bandgap del CNT.

Además de los transistores FET basados en CNT, los transistores de un solo electrón a temperatura ambiente basada en CNT metálico fueron recientemente reportados por los investigadores. Cuando el extremo de un AFM en modo de pensar se coloca debajo sobre una porción del CNT, éste crea dos bucles, lo cual constituye don uniones que se notan por forman dos barreras túnel. La estructura resultante, consiste de una isla conductora (el CNT) conectada por unas barreras túnel a los electrodos de metal, es un transistor de electrón-único. Las oscilaciones de conductancia típicas para el efecto de bloqueo de Coulomb fue observado en tales estructuras.

Todas las configuraciones de los transistores descritas anteriormente, y nano transistores son promovidos como los nuevos bloques de construcción para los dispositivos de alta densidad tales como memorias o procesadores. La integración a teraescala implica un ultra densidad de transistores, de  $10^{11}$  a  $10^{12}$  transistores por centímetro cuadrado, bajo consumo de energía, y alta velocidad. Estos requisitos no pueden ser satisfechos por transistores MOSFET que no sean CNT, los cuales muestran algunos problemas en aplicaciones de ultra alta densidad teniendo en cuenta los siguientes: 1) la disipación térmica, 2) el consumo de energía, 3) la fluctuación de los parámetros eléctricos, y 4) las fugas.

Aunque los CNTFET están en su infancia, se espera que ellos reemplacen los MOSFETs existentes en la integración a teraescala, así como en la alta conductibilidad térmica y las impresionantes densidades de corriente transportadas por los CNT. En particular, la búsqueda de circuitos lógicos y memorias basados en CNT está directamente ligada al desarrollo de CNTFET. Los primeros circuitos lógicos basados en CNTFET han usado un semiconductor CNT con un bandgap de 0.7 eV, los cuales estaban conectados por dos electrodos de oro que actuaban como fuente y drenaje. Un alambre de Al (aluminio) bajo el semiconductor CNT, el cual estaba cubierto con pocos nanómetros de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , asegurando una buena capacidad de acoplamiento entre la compuerta y el CNT. Este transistor que tiene una transconductancia de 0.3  $\mu\text{S}$  y una relación entre los estados de encendido y apagado (ON/OFF) superior a  $10^5$  a temperatura ambiente. Al crear integrados con una ganancia mayor que 10, y una corriente máxima de operación de 0.1  $\mu\text{A}$ , fue usada para demostrar que circuitos lógicos binarios básicos como los inversores (que convierten un uno lógico 1 en 0 y viceversa), NOR, o flipflops funcionan correctamente a nivel de nanoescala.

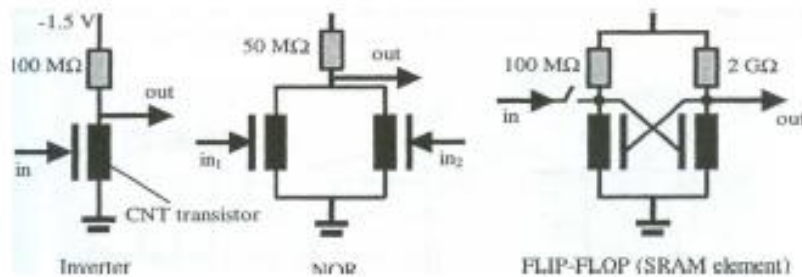


Figura. Compuertas lógicas binarias basadas en transistores CNT.

## Transistores Fet A Nanoescala

### Reducción de escala de las Dimensiones de MOSFET a unos pocos nm

El FET (transistor de efecto de campo) es un transistor cuya conducta es controlada por un electrodo llamado compuerta. La compuerta (gate) está separada de esta región activa del semiconductor llamado canal por un aislante o una región de deflexión. Los otros dos terminales del FET, llamados fuente y drenaje, respectivamente, terminan en el canal. El voltaje de compuerta modifica

la resistencia del canal y así se produce un transporte entre la fuente y el drenaje. Por consiguiente, un FET es un genuino interruptor.

Hay muchos tipos de transistor que pertenecen a la familia de los FET, pero en lo que sigue se analizará al miembro más ilustre de esta familia: el MOSFET (el semiconductor óxido-metálico FET). El nombre MOSFET sugiere que la compuerta metálica está separada de la región activa por un óxido que juega el papel de aislante. Es un ejemplo típico, una región activa de Si dopada está aislada de la compuerta metálica por una capa de  $\text{SiO}_2$ . El aislante también podría ser un dieléctrico  $\text{Si}_3\text{N}_4$  o dieléctrico altamente permisivo, como en el caso de los CNTFET. Los MOSFET se fabricaron originalmente con un canal-p (PMOS), pero los subsecuentes transistores son canal n (NMOS) se encontraron que cambian de estado (ON/OFF) más rápidamente que los PMOS. Pueden combinarse ambos tipos de MOSFET en el llamado transistor de muy bajo consumo de potencia que conserva la alta velocidad de encendido/apagado del NMOS. El transistor MOSFET es el dispositivo electrónico más simple y más eficaz, bastante fácil de fabricar comparado con otros dispositivos activos como los transistores bipolares. Debido a su simplicidad el CMOS era seleccionado como un elemento importante en los circuitos integrados que impusieron la reducción del tamaño de sus dimensiones a valores micrométricos. La longitud de la compuerta de los MOSFET usada en el presente en los microprocesadores comerciales es de 50-70 nm. Ya se han demostrado que MOSFET con una longitud de compuerta de 15nm en investigaciones, se esperan compuertas MOSFET que alcancen 9 nm en los próximos 10 años. La reducción de las dimensiones del tamaño del MOSFET incrementa la densidad de los transistores y así la complejidad y funcionalidad de los circuitos integrados (ICs); se logra una densidad de transistores de  $10^7$  en un chip en circuitos integrados a larga escala (VSLI) mientras que en ultra larga escala de integración (ULSI) hay más de  $10^9$  transistores en un chip. La tecnología de semiconductores es tan impresionante y barato que en el 2002 el número de granos de arroz producidos en un año, el precio de un grano de arroz es igual al de 100 transistores.

MOSFETs con las longitudes de compuerta (gate) de tamaño nano son en la mayoría utilizados en dispositivos nanoelectrónicos; demostrando la ley de Moore, la cual dice que cada 1.5 años desde 1970 el número de transistores por circuito integrado de un chip, como en un microprocesador, se duplicará. Otra versión de la ley de Moore afirma que las dimensiones de los CMOS se han reducido un 13% por año, lo que implica un aumento en la velocidad de los dispositivos lógicos. En particular, para los microprocesadores esto significa un aumento de la velocidad del reloj en un 30% por año. Como consecuencia, por ejemplo, el costo por un bit de DRAM, disminuye un 30% por año debido a la reducción de las dimensiones de los CMOS, por el aumento del tamaño del chip, y una mejora en la tecnología. La pregunta es por cuanto más tiempo la ley de Moore será válida. El problema es que si la longitud disminuye nuevos fenómenos físicos aparecerán a nivel nano-escala lo que impide el funcionamiento del MOSFET cuando la longitud de la compuerta gate es sólo unos nm. Las nuevas configuraciones de MOSFET



convenientes para el nivel nano-escala son necesarias, y se presentará a continuación.

La función de los transistores MOSFET puede entenderse analizando primero la configuración simple llamada capacitor MOS. Como se muestra en la siguiente figura, el capacitor MOS, consiste en una compuerta (gate) de metal y cubierto de substrato el cuál es un semiconductor semi-dopado (normalmente p-Si), separado a través de una capa de aislamiento (normalmente  $\text{SiO}_2$ ). Cuando un voltaje gate negativo  $V_g$  es aplicado, el resultado campo eléctrico confina los huecos en la interfaz entre el semiconductor y el aislador. Al contrario, los huecos son repelidos cuando  $V_g$  es positivo, creando una región de vaciamiento.

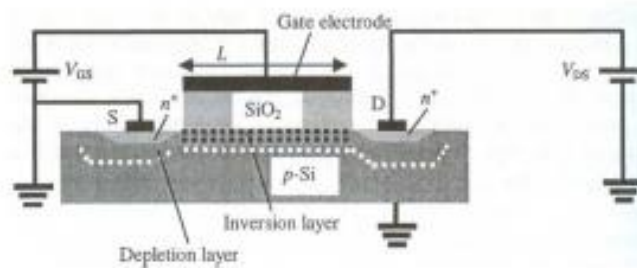


Figura. El transistor Mosfet

El MOSFET, representado en la figura anterior, está formado por dos diodos llamados la fuente y el drenaje que abarca el condensador MOS, los voltajes entre la fuente S y drenaje D, y entre el gate y la fuente que se denotan por  $V_{DS}$  y  $V_{GS}$ , respectivamente.

Entre las configuraciones más utilizadas se encuentran el MOSFET SOI y DGFET.

### **Transistores de electrón único (electrónicos simples) (uni-electrón)**

Los dispositivos de un solo electrón y, en particular, el transistor de un electrón (SET) están basados en los efectos producidos cuando se inyectan y extraen electrones solitarios de una estructura de tamaño nano quantum, como un nanocluster (arreglo de puntos cuánticos con propiedades similares) o un punto cuántico, ambos denominados genéricamente isla. Por consiguiente, la estructura rudimentaria de un dispositivo de un solo electrón se representa por un inyector de carga (drenaje), una isla de nano-tamaño, y una carga en el colector (la fuente); el voltaje aplicado en la compuerta gate controla el número de cargas en la isla. El inyector de carga y el colector son a menudo uniones de túnel metálicas que consisten en estructuras de punto de contacto. El efecto físico principal relacionado al traslado de un único electrón, desde el inyector a la isla es el bloqueo Coulumb, que consiste en la creación de un hueco en el espectro de energía de la isla que se localiza simétricamente alrededor de la energía de Fermi. El hueco, se produce por la reestructuración de cargas dentro de la isla, y se vuelve significativo cuando el cambio de potencial asociado es mayor que la

energía térmica  $E_{th}$ . Como resultado, el electrón que viaja por un túnel se detiene hasta que la energía de carga sea compensada. La conducta del dispositivo de un solo electrón que es una isla metálica débilmente acoplada a dos electrodos metálicos, puede entenderse del circuito equivalente dibujado en la siguiente figura.

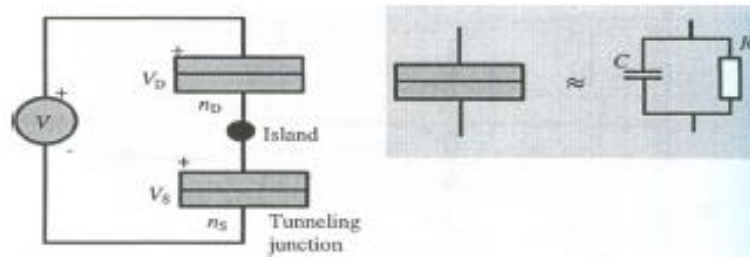


Figura El modelo del circuito equivalente a una isla metálica débilmente acoplada a dos electrodos metálicos en el cual es aplicado un voltaje.

En la figura anterior, la isla es un nanocluster (grupo de puntos cuánticos con propiedades similares) metálico débilmente acoplado (mediante una película aislante delgada) a dos electrodos metálicos. El conjunto compuesto de una película aislante delgada y de un electrodo metálico es una unión túnel, la que inyecta y extrae cargas de la isla. Esta unión túnel puede ser modelada como una configuración paralela formada por una resistencia túnel  $R_t$  y una capacitancia  $C$ . la caída de voltaje en las dos uniones túnel se denota por  $V_D$  y  $V_S$  y las capacitancias respectivas de los circuitos equivalente son por  $C_D$  y  $C_S$ , los subíndices hacen referencia al drenaje y a la fuente, respectivamente. El régimen de transporte del electrón se llama bloqueo. El régimen bloqueo de Coulomb para el conjunto fuente-isla-drenaje es ejemplificado en la siguiente figura. Cuando un voltaje es aplicado, el voltaje umbral, la energía del vacío Coulomb es  $e^2/C_{tot}$  cercano al nivel de la energía de Fermi lo que suprime el túnel entre los contactos. El voltaje umbral, permite que exista un túnel entre la fuente y el drenaje a través de la isla, de esta forma se evita el bloqueo de Coulomb, como se muestra en la parte b de la siguiente figura. Si  $C_{tot}$  es bastante grande el efecto bloqueo de Coulomb se atenúa fuertemente, y por último desaparece, y se necesita un voltaje umbral muy pequeño.

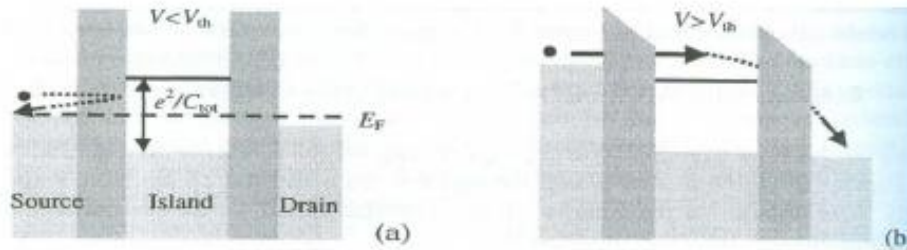


Figura. (a) El régimen de bloqueo de Coulomb, y (b) superación del bloqueo de Coulomb aplicando un voltaje suficientemente alto.

Si  $V > e/2C$  ( $V =$  voltaje umbral para vencer bloqueo de Coulomb,  $e =$  energía del electrón,  $C =$  capacitancia total de la isla) y un electrón se encuentra en la isla para, por lo cual  $n=1$  (número de orbitales), y la energía Fermi aumenta por  $e^2/C_{tot}$  un nuevo hueco se forma alrededor del nivel Fermi, se cierra el túnel de un electrón extra que ingrese o salga desde la isla al drenaje es ahora prohibido a menos que se aplique un voltaje umbral aumente a  $V > 3e/2C$ . Entre estos dos valores umbral ningún electrón fluye a través de la estructura hasta el electrón mediante el túnel isla-disipador, hasta que la isla regrese al estado  $n=0$  y el nivel Fermi en la isla disminuye y otro electrón pueda ingresar a la estructura; este ciclo es repetido varias veces.

Si la resistencia túnel en la unión de la fuente es mucho mayor que en la unión del drenaje (si  $R_t = R_{s,t} \gg R_{d,t}$ ), pero las capacitancias correspondientes son iguales, la corriente a través del conjunto fuente-isla-drenaje es controlada por el voltaje  $V_D = V/2 + ne/C_{tot}$  que decae a lo largo de la unión del disipador. El voltaje a través del drenaje disminuye en pasos de  $e/C_{tot}$ , cada vez que el voltaje umbral del drenaje aumenta al incrementar los valores  $n$ . Entonces, los saltos en la corriente están dados por

$$\Delta I = e/C_{tot}R_t \quad (25)$$

$\Delta I =$  salto de corriente;  $e =$  energía del electrón  $C_{tot} =$  capacitancia total de la isla

$R_t =$  resistencia total de la isla

La característica I-V del conjunto fuente-isla-drenaje toma la forma específica de escalera representada en la siguiente figura, la cual refleja el efecto de cara en la isla. Esta sorprendente forma i-V que es una conducta macroscópica de fenómenos quantum sólo ocurre cuando la energía de carga Coulomb prevalece por sobre la energía térmica y cuando las fluctuaciones en el número de electrones en la isla son lo bastante pequeñas para permitir la localización de una carga en la isla. Esta última condición se cumple cuando

$$R_t \gg \frac{h}{e^2} = 25.8 \text{ k}\Omega$$

(26)

$R_t$  = resistencia total de la isla

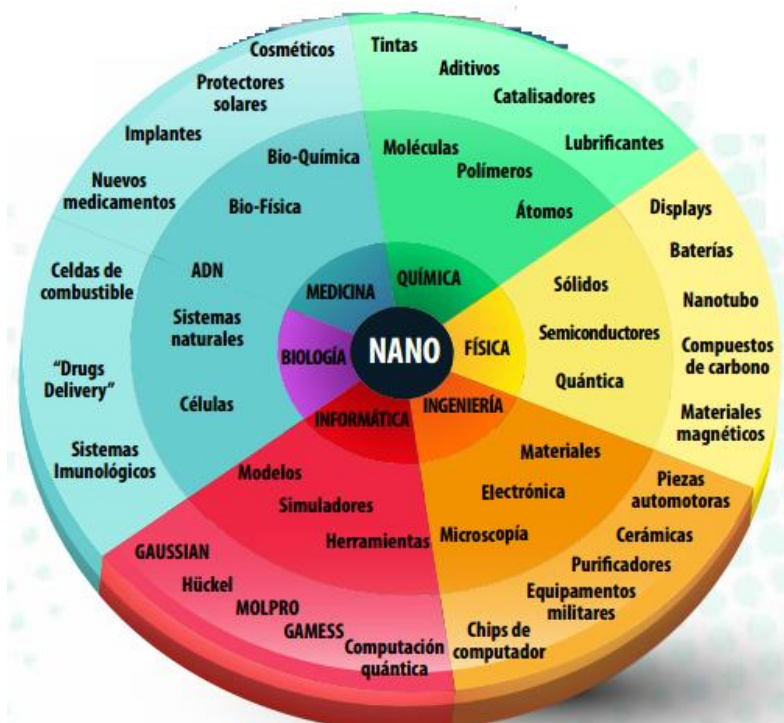
$h$  = constante de Planck

$e$  = energía del electrón

## 2.4. APLICACIONES DE NANOTECNOLOGÍA

Para algo tan pequeño, las implicaciones y amplitud de los usos de la nanotecnología son enormes. Estas son algunas aplicaciones de interés actual:

Figura 22. Diferentes campos de aplicación de la nanotecnología



Fuente: Reyes Meneses Andrea. Castro Castas, Jairo Antonio. Conceptos de nanociencia y nanotecnología. Bogotá. 2013, 13p

### 2.4.1. Aplicaciones de nanotecnología en medicina

#### 2.4.1.1. Diagnóstico

*Nanodispositivos:* pueden medir iones, moléculas o proteínas, pequeñas secuencias de ADN diagnosticas de una condición médica o enfermedad en particular (puede reconocer eventos genéticos y moleculares, lo que ofrece el potencial de detectar señales moleculares poco comunes asociados con malignidad).

Algunos ejemplos de dispositivos de diagnóstico son: biosensores sensibles construidos con componentes a nanoescala (por ejemplo, nanopalancas, nanocables y nanocanales), biosensores plasmónicos, biosensor de nariz artificial, microarreglos, nanocódigos de barras, laboratorio en un chip (Habilitadores de investigación como nanolabs con chip de microfluidos capaces de monitorizar y manipular células individuales).

#### 2.4.1.2. Imágenes

*Agentes de contraste:* al mejorar las propiedades físicas y químicas de los agentes de contraste se pueden concentrar y direccionar en el sitio de interés.

Algunos ejemplos de dispositivos son:

*Nanopartículas de perfluorocarbono* como agentes de contraste en imágenes de resonancia magnética y ultrasonido. Permitiendo a los científicos clínicos medir y controlar la cantidad de un complejo anticuerpo-nanopartículas que se acumula específicamente en un área específica, así como su desaparición después del tratamiento.

*Nanocápsulas de oro* como agentes diagnósticos en cáncer; diagnósticos in situ, en las que se emplean cámaras en capsulas endoscópica para el diagnósticos de problemas digestivos.

Las nanopartículas de oro para detectar la enfermedad en estadio temprano de Alzheimer.

*Los puntos cuánticos* son semiconductores nanocristales que pueden mejorar imágenes biológicas para el diagnóstico médico. Cuando se ilumina con luz ultravioleta, que emiten un amplio espectro de colores brillantes que se pueden usar para localizar e identificar tipos específicos de células y actividades biológicas. Estos cristales ofrecen óptico de detección de hasta 1.000 veces mejor que los tintes convencionales utilizados en muchos ensayos biológicos, tales como imágenes de resonancia magnética, y hacen significativamente más información.

#### 2.4.1.3. Terapia

*Terapia específica:* con el fin de solo atacar células malignas.

En la terapia se ve en la entrega de fármacos dirigidos (Un potente tratamiento de cáncer, lo que minimiza el riesgo para los tejidos normales),

silenciadores RNA, terapia génica, portadores de fármacos, teragnosis, un ejemplo de este son las cápsulas de oro para la toma de imágenes y tratamiento de cáncer al mismo tiempo.

#### *Medicina regenerativa*

Algunos ejemplos son: Ingeniería de tejidos y biomateriales, nanoingeniería y regeneración de huesos, regeneración neuronal (La investigación está en marcha), neuroprótesis, estimulación neuronal, monitoreo y manejo del dolor.

### 2.4.2. Aplicaciones de nanotecnología en medio ambiente

#### 2.4.2.1. Mitigación y remediación

Se pueden desarrollar herramientas específicas para ciertos contaminantes, incrementando su afinidad y selectividad, por ejemplo en el caso de los metales.

Dentro de los nanomateriales que están siendo inventados para remediación están:

- Las nanopartículas de hierro y dendrímeros. Las Nanopartículas algún día serán usadas para limpiar los contaminantes del agua industriales en las aguas subterráneas a través de reacciones químicas que hacen inofensivos, a un costo mucho más bajo que los métodos que requieren de bombeo del agua de la tierra para su tratamiento.
- Nanopartículas de TiO<sub>2</sub> y ZnO, son usadas para remediación fotocatalítica;
- Uso de aerogeles y sólidos absorbentes,
- Nanomembranas,
- Nanofiltros. Por ejemplo los filtros de aire de una cabina de avión y otros tipos de filtros de aire que permiten "la filtración mecánica; también pueden contener capas de carbón que eliminan los olores. Casi el 80% de los coches vendidos en los EE.UU. incluyen filtros basados en la nanotecnología incorporadas.
- filtros superhidrofílicos.
- Cables de óxido de manganeso de potasio. Los investigadores han desarrollado un "toalla de papel tejida a partir de diminutos cables de óxido de manganeso de potasio, que puede absorber 20 veces su peso en aceite para aplicaciones de limpieza.

#### 2.4.2.2. Prevención de contaminación

Con métodos que incrementan la eficiencia de ciertos procesos industriales, se pueden crear materiales que no contaminen.

Algunos ejemplos de prevención de contaminación: Plásticos biodegradables; materiales nanocristalinos compuestos que reemplacen los electrodos grafito y litio en las baterías recargables; vidrios autolimpiables; telas hidrofóbicas; recubrimientos y telas autolimpiables; recubrimientos y textiles antimicrobianos; nanopartículas de plata como antimicrobianos usados en productos como cosméticos, desodorantes, fertilizantes, medias, lavadoras, refrigeradores, tratamientos para maderas, teclados.

#### 2.4.2.3. Monitoreo ambiental

El uso de sensores y soluciones de nanotecnología en la identificación de componentes químicos tóxicos en bajas concentraciones ya sea en muestras de agua o suelos, el uso de nanomateriales con propiedades biológicas y químicas especiales puede mejorar la sensibilidad y por ende la precisión del sensor.

Por ejemplo sensores basados en nanocables y nanotubos de carbono que actúan como sensores biológicos y químicos, pueden detectar diferentes analitos en tiempo real, los cuales podrán servir para desarrollar sensores que detecten agentes biológicos, químicos y patógenos en agua, aire y comida.

#### 2.4.3. Aplicaciones de nanotecnología en Energía

##### 2.4.3.1. Energía solar

Dentro del grupo de energías renovables, la energía solar tiene un potencial.

Ejemplos:

*Celdas fotovoltaicas:* estos dispositivos convierten la energía solar en energía eléctrica. Son los materiales de los que están hechas y que permiten aumentar la eficiencia de las mismas, es aquí donde la nanotecnología juega un papel importante, brindando la posibilidad de nuevos materiales y nuevas técnicas de fabricación.



*Nanocristales*: usados para aumentar la corriente.

Celdas fotoelectroquímicas: usan una sustancia que emula la función de la clorofila en la fotosíntesis.

También se encuentra celdas solares con puntos cuánticos, superficies superhidrofóbicas.

#### 2.4.3.2. Energía del hidrógeno

El hidrógeno puede ser usado como portador de energía para generar electricidad.

Ejemplos:

- Extracción fotoquímica de hidrógenos a partir de agua, usando luz solar.
- También se encuentra las celdas de combustibles de hidrógeno, celdas de combustible con membranas de intercambio de protones.

#### 2.4.3.3. Baterías recargables

Dispositivos de almacenamiento de energía (que son menos inflamables, tiene rápida carga, son más eficientes y mantiene la carga eléctrica por más tiempo)<sup>5</sup>, usados en computadores y equipos móviles, donde la potencia y la ligereza son importantes.

Ejemplos:

- Materiales compuestos nanocristalinos y nanotubos son usados para reemplazar los electrodos de grafito y litio.
- Baterías de papel: Combinan celulosa y nanotubos de carbón.

#### 2.4.3.4. Termoelectricidad

Los materiales termoeléctricos son materiales funcionales que tienen la capacidad de convertir calor en electricidad y viceversa.

---

<sup>5</sup> Nano.gov. National Nanotechnology Initiative. Nanotechnology Timeline. 2017. Disponible en: <http://www.nano.gov/you/nanotechnology-benefits>

Este tipo de energía puede ser generada a partir de cualquier material conductor.

En este campo la nanotecnología está en la búsqueda de materiales que sean buenos conductores eléctricos y con baja conductividad térmica, hasta el momento se sabe de materiales nanoestructurados termoeléctricos como aleaciones de ZrNiSn y Zn<sub>4</sub>Sb<sub>3</sub>.

#### 2.4.3.5. Ahorro de energía

Materiales usados en la construcción como materiales que aumenten la luminosidad; materiales más resistentes y más ligeros; recubrimientos fotocromáticos en el uso de material piezoeléctrico para el aprovechamiento de la energía mecánica (sliding motion).

A su vez los investigadores están desarrollando cables que contienen nanotubos de carbono para tener una resistencia mucho más baja que los cables de alta tensión utilizados actualmente en la red eléctrica y por lo tanto reducir la pérdida de potencia de transmisión.

#### 2.4.4. Aplicaciones de nanotecnología en el empaqueo de alimentos y monitoreo

##### 2.4.4.1. Envasado

La nanotecnología ha revolucionado la industria alimentaria en el desarrollo de nuevos materiales que permitan detectar contaminantes, controlar trazabilidad y avanzar en el desarrollo molecular y celular.

Algunos ejemplos:

- Nanorecubrimientos que mantienen la frescura de los alimentos, alargando su vida útil.
- Nanomateriales con propiedades antimicrobianas.

##### 2.4.4.2. Desarrollo de nuevos productos

Se busca lograr alimentos más seguros, saludables, nutritivos y de más sabor.

Por ejemplo, Nanoalimentos funcionales, pueden servir para el tratamiento de enfermedades y la prevención de enfermedades.

#### 2.4.4.3. Calidad y seguridad alimentaria

En este se encuentran los biosensores que se encargan de monitorear la calidad de los alimentos.

Estos sensores se utilizarían para detectar contaminación microbiana.

#### 2.4.5. Aplicaciones en Electrónica

##### 2.4.5.1. Circuitos integrados

Reducir el tamaño (a nanoescala) de los transistores utilizados en circuitos integrados, los microprocesadores para computadores, y dispositivos de almacenamiento de memoria.

Ejemplo de circuitos integrados: Circuitos de mayor conmutación CMOS; procesadores con materiales high k, con bajo consumo; fotónica, electrónica cuántica, transistores de nanotubos de carbono, electrónica molecular.

##### 2.4.5.2. Almacenamiento de datos

Componente clave de muchos dispositivos usados hoy en día como computadores (disco duro y RAM), tarjetas de memoria, reproductores multimedia.

Ejemplo de almacenamiento de datos:

- MRAM: La memoria magnética de acceso aleatorio, donde cada celda de la memoria está confirmada por dos finas capas ferromagnéticas, separadas por una capa aislante. Pueden salvar incluso los datos cifrados durante el apagado del sistema o un accidente
- FeRAM: una capa ferroeléctrica reemplaza la capa dieléctrica de la MRAM.
- RRAM: el patrón de conducción es creado a través de un material dieléctrico.
- PCM: Se usa un material cristalino y amorfo.

- Nanotubos RAM.

#### 2.4.5.3. Pantallas

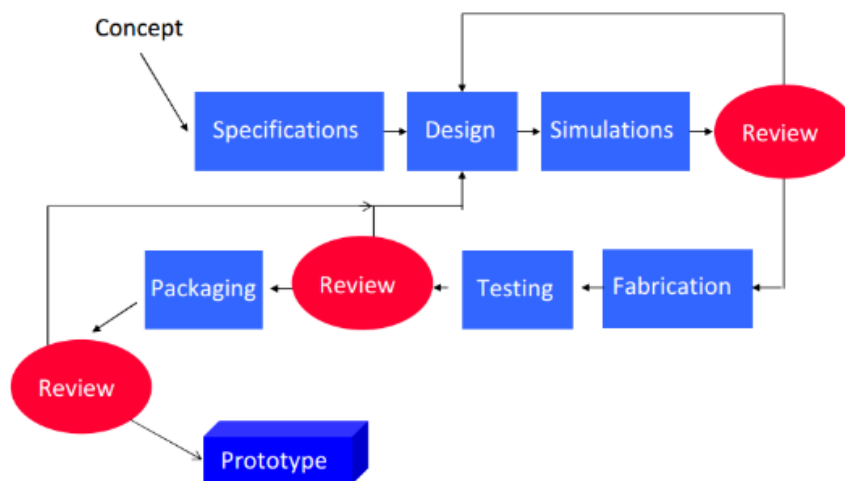
La mejora de las pantallas de visualización en televisores, computadores portátiles, celulares, cámaras digitales y otros dispositivos electrónicos. Esto implica reducir el consumo de energía mientras disminuye el peso y el grosor de las pantallas. Para lo cual incorporan:

- OLEDS se usan moléculas orgánicas impresas sobre un sustrato polimérico que permite multicapas, son usados en pantallas de dispositivos móviles cámaras, bombillos, radios y televisores. ofrecen imágenes más brillantes en un formato plano, así como ángulos de visión más amplios, un peso más ligero, mejor densidad de imagen, menor consumo de energía, y los tiempos de vida más largos.
- QDLEDS: Los puntos cuánticos son partículas semiconductoras que emiten un color específico, son muy eficientes y pueden ser usados en pantallas y fuentes de luz.

### 3. METODOLOGÍA DE DISEÑO DE SISTEMAS A NANOESCALA

A continuación se muestra el proceso de diseño conceptual, modelación y simulación por nanofabricación.

Figura 23. Metodología de diseño conceptual, modelación y simulación por nanofabricación Bottom Up (de abajo hacia arriba)



Fuente: Jaime Castillo y otrs MEMORIAS I SEMINARIO INTERNACIONAL DE NANOTECNOLOGÍA UDES. Universidad de Dinamarca DTU 2011

#### 3.1. Aplicaciones de nanotecnología computacional en el diseño de sistemas a nanoescala.

Diversos software y variedad de URLs permiten la visualización de estructuras en 3D, tanto iones o moléculas.

Algunos ejemplos: Molecular Workbench, RasMol, VMD, PyMOL, InSight II, Chem3D, pyChemia para el descubrimiento de nuevos materiales, donde combinan diversas estrategias computacionales para el diseño de sistemas macro y nanométricos.

etc

##### 3.1.1. Nanotecnología computacional con aplicación dinámica molecular software Molecular Workbench

El software Molecular Workbench (MW) es un navegador especial para abrir páginas con los modelos incorporados y simulaciones, que se llamara páginas de MW a lo largo del presente documento, a distinción de otras páginas web como las páginas de HTML. Esta parte del software se parece a un navegador convencional de Internet de muchas formas, pero no está dirigida a ser un navegador de Internet. Sólo tiene una interfaz de usuario estándar de un navegador.

Por ejemplo, tiene una navegadora barra de herramientas que provee botones Back, Forward, Home, and Reload. Hay también un campo de dirección que muestra la dirección de URL de la página actual, toma el aporte de una nueva dirección y mantiene direcciones recientes en una lista desplegable. Una página MW puede tener hipervínculos para otras páginas de MW o recursos que tienen una dirección URL. Las páginas frecuentadas son automáticamente guardadas en reserva para ayudar a cargar rápidamente y trabajar offline, y actualizadas cada vez que hay nuevas versiones en el servidor donde residen. Una página puede ser marcada como favorito, o puede guardarse en el disco duro. Las teclas rápidas convencionales pueden servir para funcionalidades similares.

Como un navegador, el MW puede usarse para abrir cualquier página de MW (creado por sistema de paternidad intelectual del MW) en cualquier servidor Web de HTTP.

Si el usuario o persona desea hacer modelos o crear actividades con el software Molecular Workbench y publicarlas en la Internet, puede ser completamente independiente del desarrollador de MW, con tal de que tenga su propio espacio de trama para subir a Internet.

La plataforma de MW es mucho más que simplemente una herramienta para navegar paginas MW. De hecho, es un sistema todo-en-uno que contiene los siguientes módulos:

- Un set de constructores de modelos de partículas 2D y 3D, simuladores, y sus medios de scripting.
- Un sistema autor para construir interfaces de usuario gráfico para sus modelos.
- Extensibilidad: la habilidad de incorporar otras simulaciones a través del soporte de applet /plug-ins. (Anexo 2)

#### **3.1.1.1. Demostración de los modelos de la categoría nanotecnología**

La categoría de nanotecnología contiene varios modelos, principalmente para demostrar la capacidad de los motores de simulación y el sistema de autoría. Es posible que desee derivar sus propios modelos a partir de estas demostraciones, o agregar más materiales para que sean más útiles, o simplemente utilizarlos tal como son.

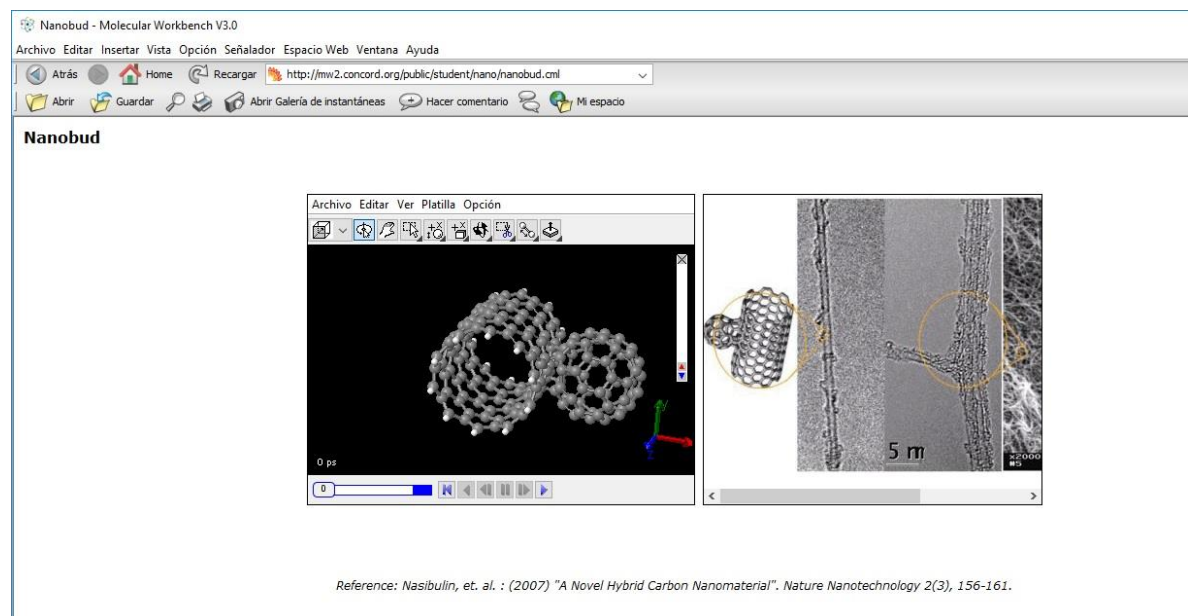
## Nano fabricación and maquinaria

### a. Nanostructures:

#### Nanobud: a un Nuevo nano material

NanoBuds es un material recién descubierto combinando nanotubos de carbono con futbolenos en donde los futbolenos tienen enlaces covalentes a las paredes exteriores de los nanotubos subyacentes.

Figura 24 . Nanobud



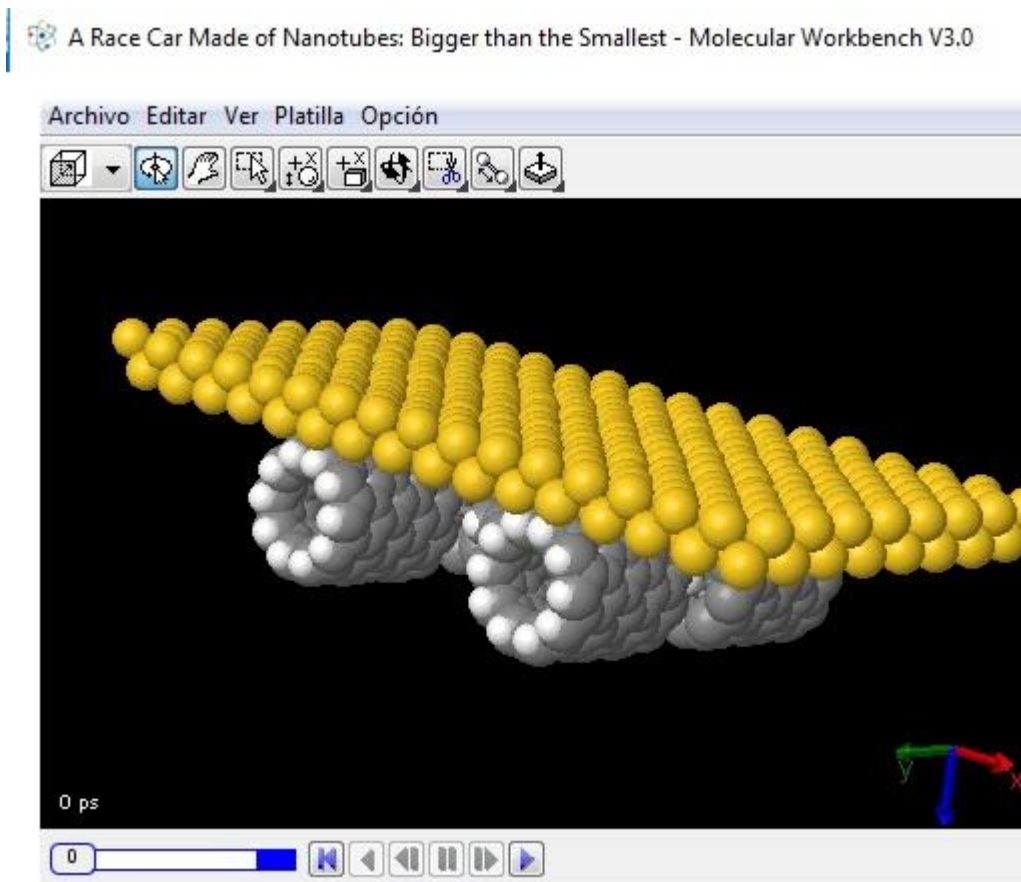
#### Un nano auto hecho de nanotubos

A diferencia del nanoauto de futboleno, este modelo está completamente una fantasía --- nadie ha sintetizado un vehículo de una molécula como

este. Un químico inmediatamente puede señalar que los ejes tienen enlaces largos que son físicamente imposibles. Esto es porque querían construir el modelo rápidamente y dejar los detalles químicos para ser arreglados más tarde, quizá por un ingeniero químico.

Este nanoauto podría ser mecánicamente más estable que el de futboleno, porque sus ruedas se parecen a más los autos que actualmente se conducen actualmente en la vida macroscópica. El nanotubo está garantizado que girara sobre sólo un eje. Tiene más superficie de contacto con la superficie (por lo tanto --- probablemente las fuerzas --- más grandes para girar las ruedas).

Figura 25. Nanoauto



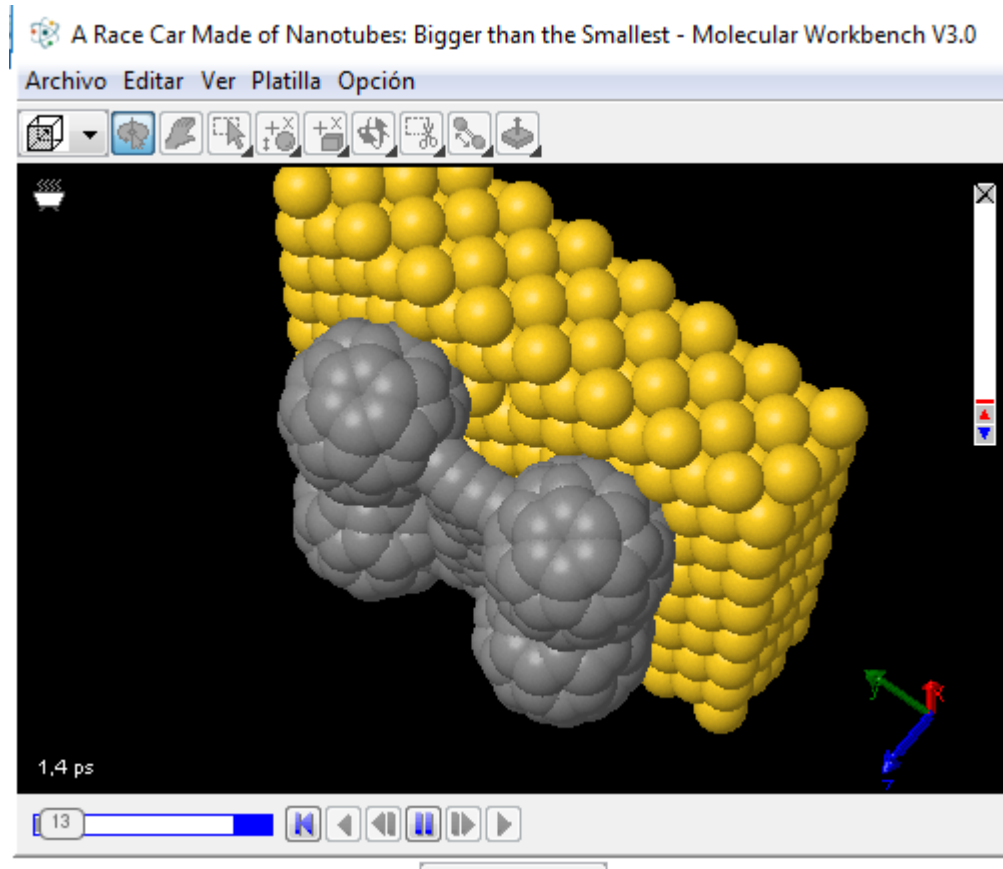
### Un nanoauto hecho de futbolenos

Aunque el anteriormente citado modelo de un coche nano se trazara rápidamente sin consideraciones de fondo en la química (por ejemplo, los hidrógenos son saltados), es similar al primer nanoauto del mundo hecho



por el grupo de la Universidad Rice. Tiene cuatro moléculas de futboleno como ruedas, y algunas moléculas de carbono como ejes y un chasis. En la simulación se puede revisar la dinámica molecular de el, pero actualmente no anda como un coche aún. El grupo de la Universidad Rice ha reportado que cuando el sistema es calentado a arriba 170, las ruedas en rodarían (en vez de resbalar como si fuera hielo) y moverían el coche. Es, sin embargo, incierto si el nanoauto continúa moviéndose en una dirección como un auto en nuestra escala.

Figura 26. Un nanoauto hecho de futbolenos

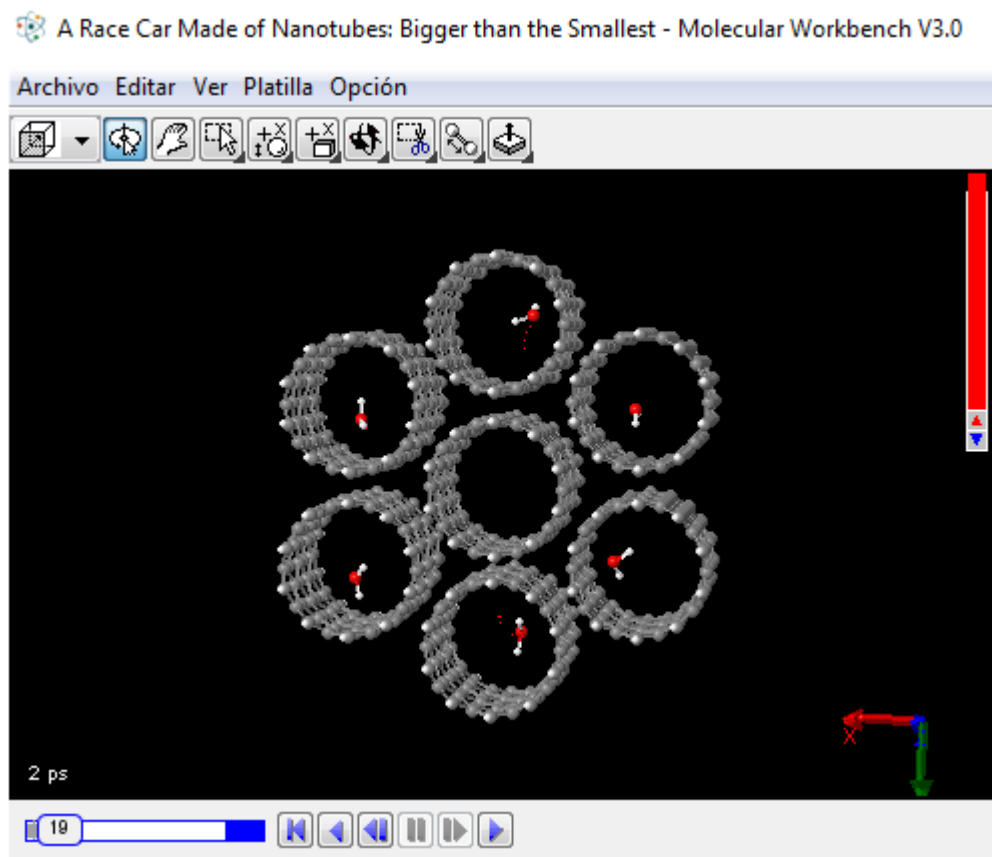


### Una Carrera de moléculas de agua a través de nanotubos de carbón

Este modelo tiene 998 átomos, solo 2 átomos bajo el límite actual que colocaron (1000). Tiene 1342 enlaces radiales, 2386 enlaces angulares y 910 enlaces de torsión. Si hubieran tomado en cuenta los cálculos para todos los átomos y los enlaces, habría sido tan lento que probablemente tomaría algunas horas para la simulación de 100 picosegundos. Para simplificar la simulación, arreglaron los siete nanotubos juntos y dejaron sólo a las moléculas de agua moverse. Pensaron que ésta es una buena aproximación, porque los nanotubos deben estar rígidos en aplicaciones en el mundo real a fin de que puedan permanecer estables.

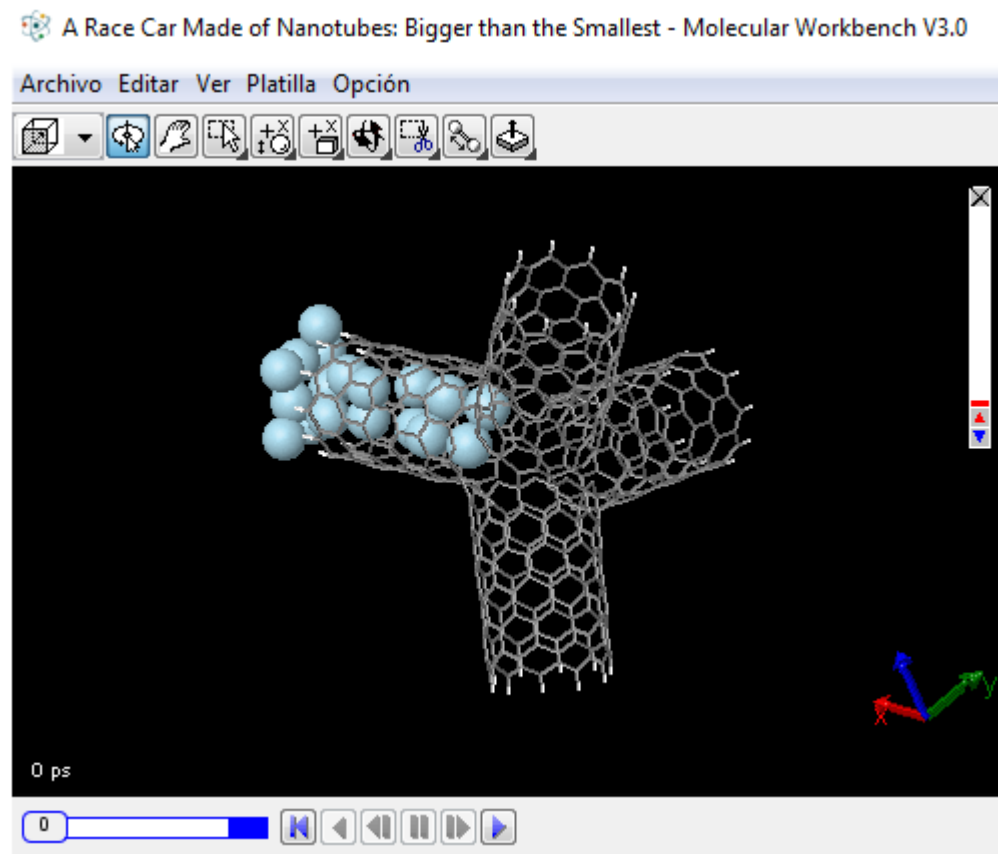
Aunque los nanotubos estén fijos, sus interacciones con las moléculas de agua se calculan todavía. Por consiguiente, tal simplificación puede ser considerada como moléculas de agua moviéndose entre los campos de fuerza estáticos establecidos por los átomos de carbono de los nanotubos.

Figura 27. Una Carrera de moléculas de agua a través de nanotubos de carbón



Átomos de neón difuminándose en una junta de nanotubo cuádruple

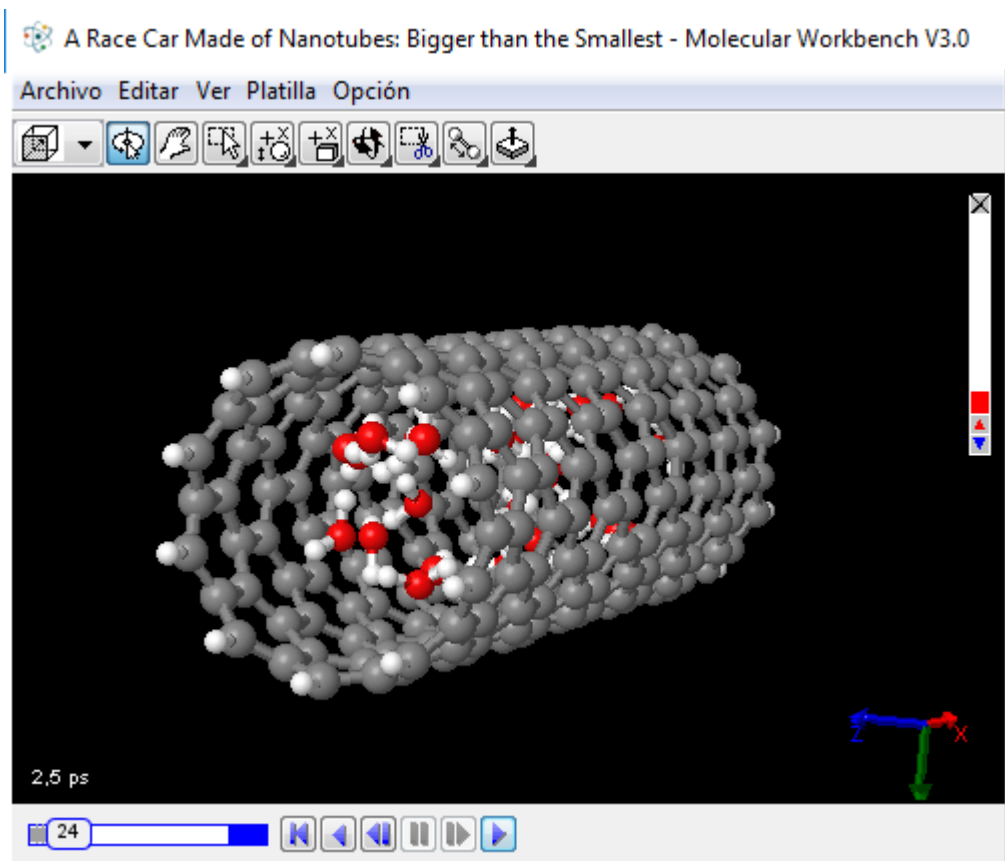
Figura 28. Átomos de neón difuminándose en una junta de nanotubo cuádruple



### **Moléculas de agua en un nanotubo**

Note que esta simulación cuesta muchos cálculos y pueden correr muy lentamente si el usuario tiene un computador viejo.

Figura 29. Moléculas de agua en un nanotubo

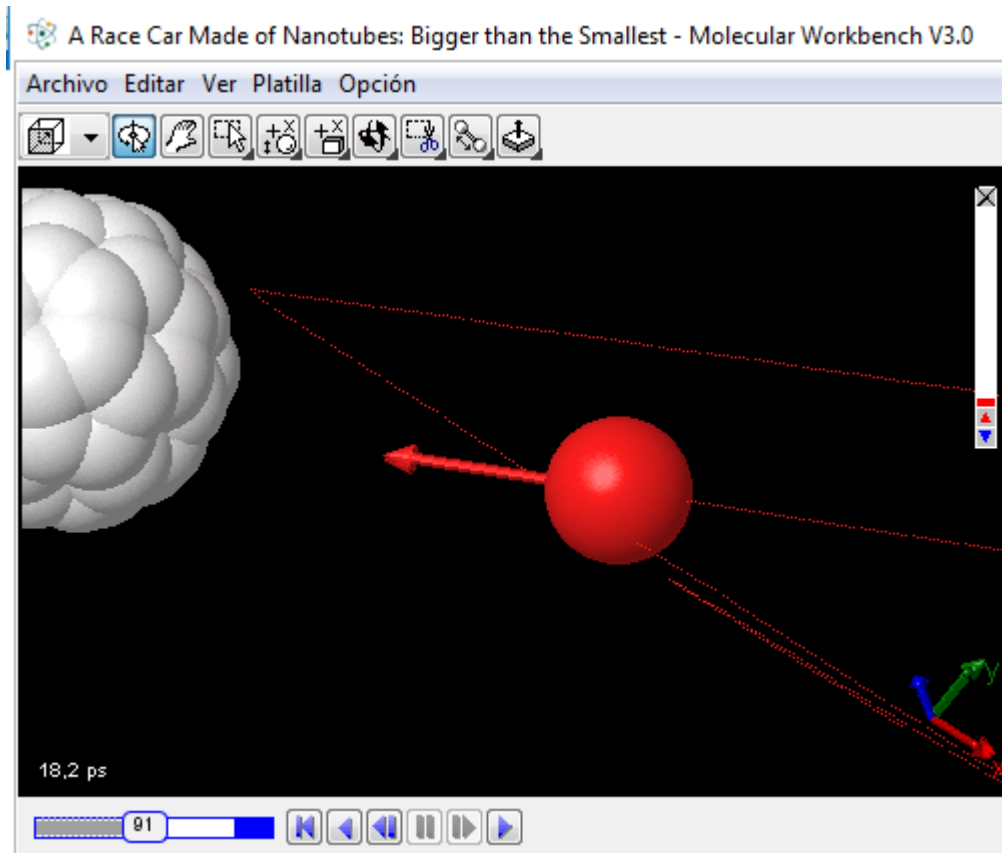


### La adsorción de un nanotubo en una superficie de oro

Esta simulación demuestra cómo un nanotubo (posiblemente) es adsorbido encima de una superficie de oro (¿100?). La temperatura es mantenida en 300 K. Note que esta simulación cuesta muchos cálculos y puede correr muy lentamente si usted tiene un computador antiguo.

## Colisión entre un átomo de xenón y un futboleno

Figura 30. Colisión entre un átomo de xenón y un futboleno



El modo sombreado de la energía cinética es escogido en la simulación. La masa de un futboleno es  $60 \times 12 \text{ g/mol} = 720 \text{ g/mol}$ . La masa de un átomo de xenón es  $131 \text{ g/mol}$ .

### b. Nano fabricación:

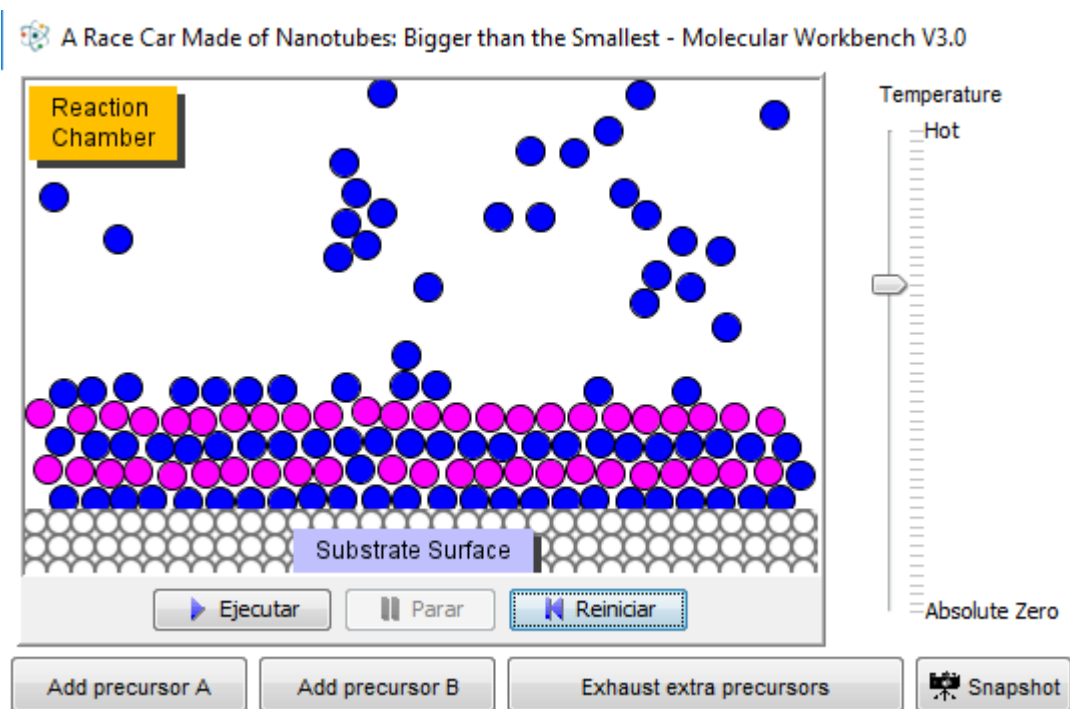
#### Deposición atómica de capas: un experimento Virtual

La deposición química de vapor (CVD) es un proceso químico para depositar en capas delgadas películas de materiales diversos en la superficie de un sustrato sólido de fuentes de moléculas gaseosas (los llamados precursores). La tecnología CVD es ampliamente usada en industria para fabricar dispositivos semiconductores.

En esta actividad, el usuario o usted puede correr una simulación de la técnica de deposición atómica de capas (ALD), que es un proceso CVD en el cual dos precursores complementarios. Al (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> y H<sub>2</sub>O) son alternativamente introducidos en la cámara de reacción. Típicamente, uno de los precursores se adsorberá en la superficie del sustrato. El precursor adsorbe hasta que satura la superficie y no tendrá crecimiento posterior hasta que el segundo precursor sea introducido. El grosor de la capa está controlada por el número de ciclos de precursor en vez del tiempo como es el caso para la el proceso convencional CVD. En teoría, ALD permite un control preciso de espesor de la película y uniformidad.

El reto planteado para el usuario es "cultivar" un sándwich en capas delgadas de película, e.j. ABABABABAB...., Donde A y B son dos precursores virtuales representados por partículas azules y púrpuras, respectivamente. Dé clic aquí para mirar una muestra delgada de la película vuelto del reactor virtual ALD debajo.

Figura 31. Deposición atómica de capas: un experimento Virtual



Procedimientos experimentales:

Paso 1. Presionar el botón "Run", entonces oprima "Add precursor A " para agregar algunos precursores de tipo A. Usted puede dar clic algunas veces para agregar suficientes precursores. No agregue a los precursores de tipo B en este punto.

Paso 2. Los precursores adsorberán hacia la superficie del sustrato. Espere a que formen una monocapa. Usted podría necesitar agregar a más precursores A si los añadidos no son suficientes para llenar todas las posiciones en la superficie.

Paso 3. Una vez que tenga una monocapa, presione "Exhaust extra precursors " para remover los precursores que no fueron adsorbidos. Usted podría tener que hacer esto varias veces para tener una capa única perfectamente limpia.

Paso 4. Presione "Add precursor B " para agregar a algunos precursores de tipo B . Repita el paso 2 y 3 para conseguir una monocapa perfecta de B.

Paso 5. Alternando capas de los dos tipos de precursores, usted podrán crear estructura de un sándwich, que puede ser de muchos estratos de grueso. Note que la simulación se pondrá más lenta cuando el grosor de la capa crezca. Esto es simplemente porque tarda más calcular el movimiento de más átomos --- no quiere decir que el sistema se vuelva más frío. La temperatura del sistema es determinada por el dispositivo deslizante de la derecha.

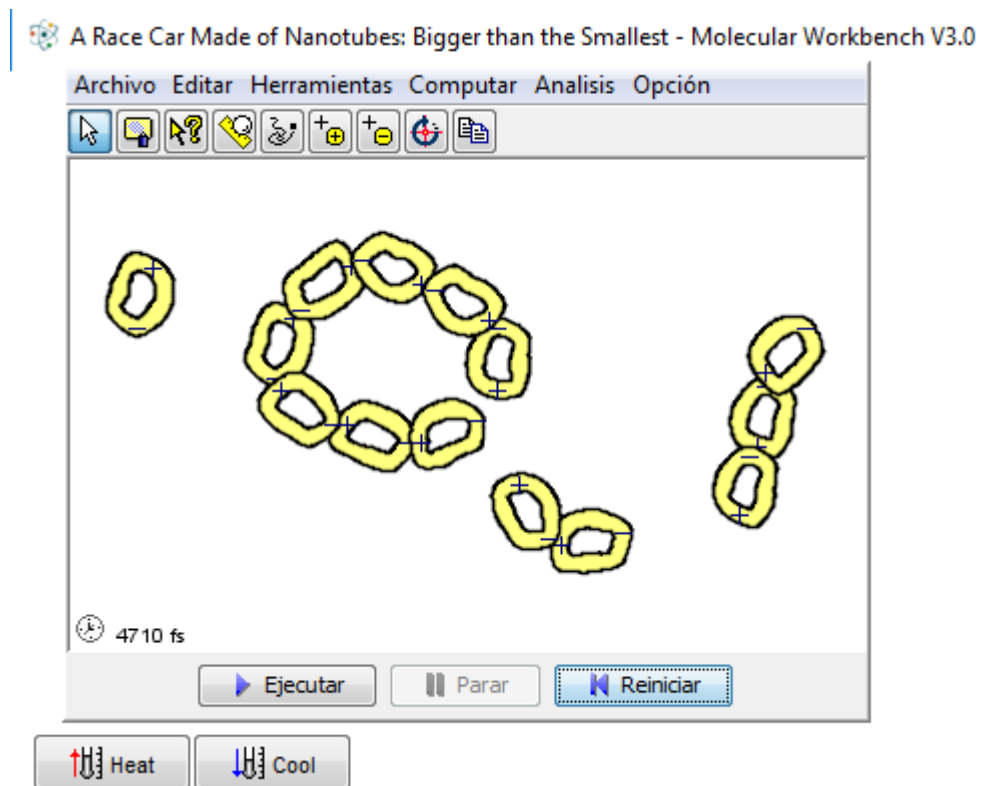
Paso 6. Podría obtener imperfecciones, lo que es completamente aceptable. Pruebe ajustar la temperatura durante la simulación para experimentar cómo usar el tratamiento térmico para controlar la calidad de su película delgada.

Paso 7. Mientras está haciendo este experimento, oprima el boton "Snapshot " cada vez que usted quiera sacar una foto del sistema. Cuando usted complete su experimento, oprima el botón de debajo para crear un informe de su experimento y haga alarde de sus capas delgadas!

## Auto-ensamble

Muchas funciones de células vivientes se hacen posible por la organización espontánea de moléculas de tipos diversos en una forma asombrosamente precisa y replicable. Éste es llamado auto-ensamble. Entender el auto-ensamble podría ayudar a las personas a explotar los mecanismos y hacer productos innovadores que no habrían sido posibles de sintetizar usando métodos tradicionales. El auto-ensamble es considerado una nanotecnología muy prometedora.

Figura 32. Auto-ensamble





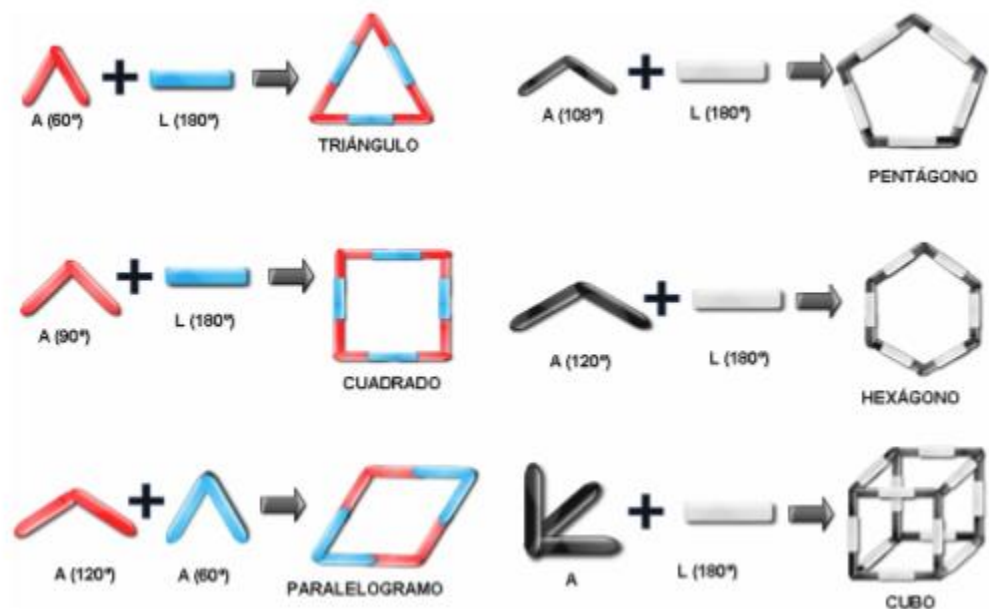
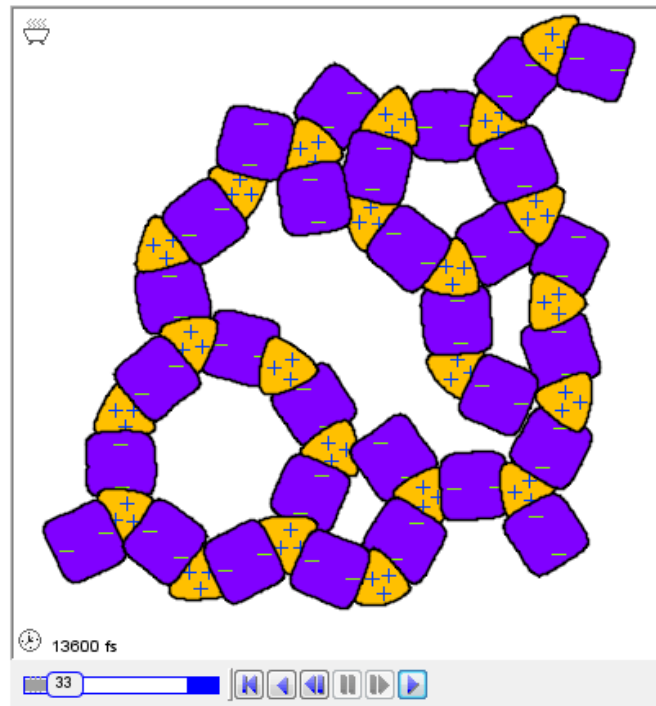


Figura El autoensamblado de bloques moleculares de distinta composición (A≡ subunidad angular/L≡Subunidad lineal) permite sintetizar un amplio rango de supemoléculas cuya estructura y propiedades pueden ser prediseadas

### Una cuadrícula que se ensambla sola

Este modelo contiene dos formas simples: los triángulos equiláteros cargados positivamente en todos los tres lados, y los cuadrados negativamente cargados en dos lados. Estas formas se auto-reúnen en una estructura compleja.

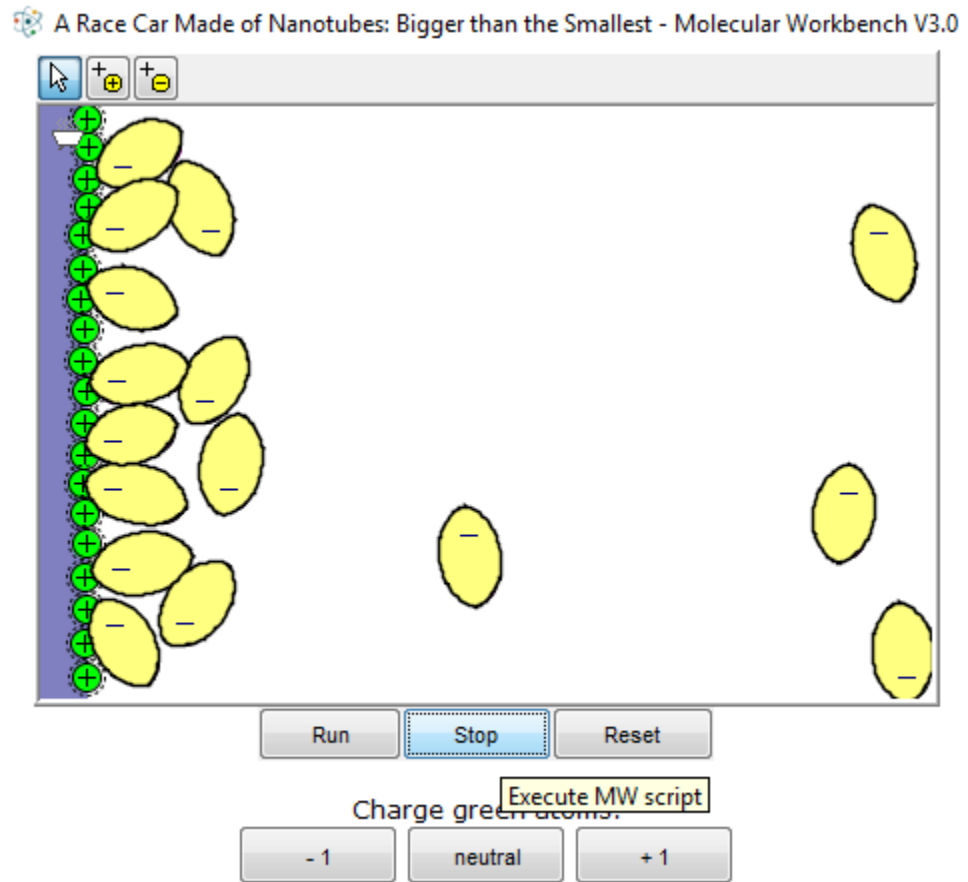
Figura 33. Una cuadrícula que se ensambla sola



### **Auto-ensamble electrostático: creando monocapas**

Los científicos sólo están comenzando a aprovechar el auto-ensamble para crear novedades en la escala molecular. Esto es parte de la nanotecnología, un nuevo campo que un día puede llevar a la invención de máquinas moleculares diminutas que hacen cosas increíbles como patrullar su corriente sanguínea en busca de virus, o limpiarlo de contaminantes molécula por molécula. Una cosa útil que las personas ya pueden hacer con el auto-ensamble es una monocapa. Una monocapa es una hoja de exactamente una molécula de gruesa. Los materiales se comportan diferente en monocapas, así es que pueden tener un montón de propiedades interesantes, como el aumento de conductividad y flexibilidad. El modelo de debajo muestra algunas moléculas amarillas que se reúnen en una monocapa en la superficie verde. Maneje el modelo, entonces use los botones para cargar los átomos verdes.

Figura 34. Auto-ensamble electrostático: creando monocapas



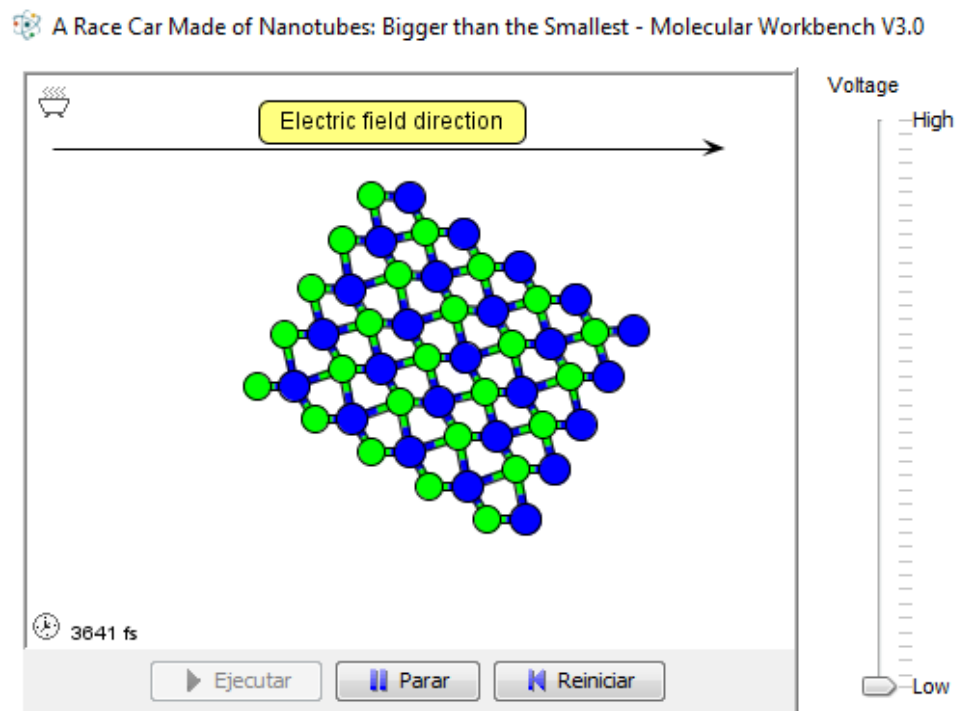
### 3.1.1.2. Ciencia de materiales

#### ➤ El efecto piezoeléctrico

El efecto piezoeléctrico es la conversión entre electricidad y el movimiento mecánico. Las fuerzas mecánicas en materiales piezoeléctricos pueden producir electricidad (por ejemplo los chispeadores piezoeléctricos). Inversamente, aplicar voltaje en algunos materiales piezoeléctricos da como resultado distorsión o deformación. Por ejemplo, los materiales cerámicos piezoeléctricos se han usado para mover la punta de un microscopio explorador de efecto de túnel (STM). Este modelo muestra la conversión de electricidad a movimiento mecánico. Mueva el dispositivo deslizante para

cambiar el voltaje y observe el cambio del cristal. El final del dispositivo deslizante concuerda con voltaje cero.

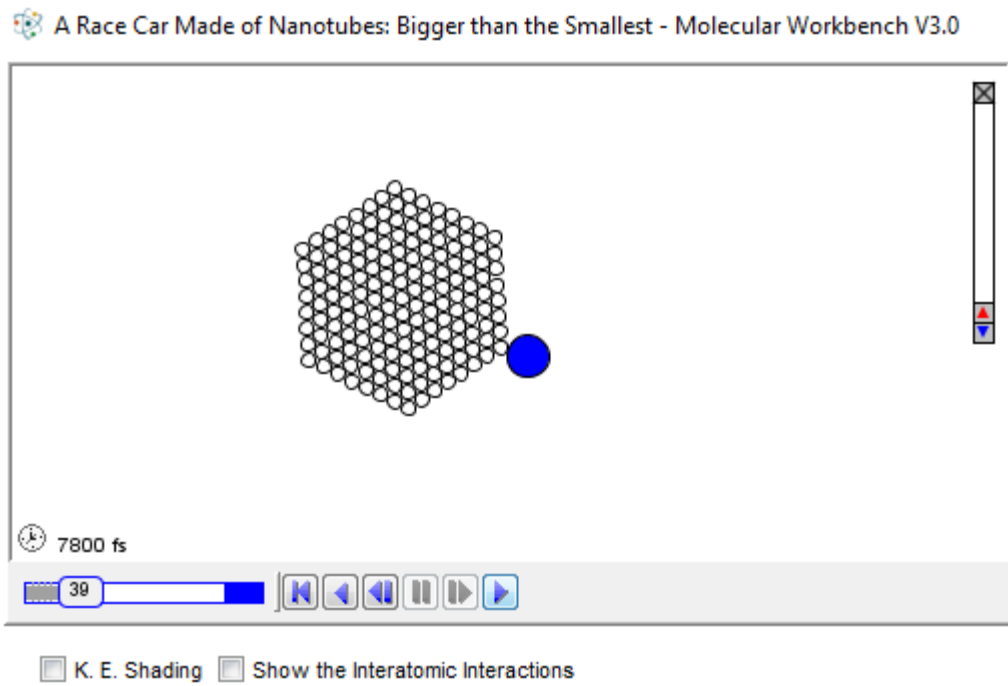
Figura 35. El efecto piezoeléctrico



➤ **Comportamiento oscilatorio de la adhesión en una superficie de nanopartícula**

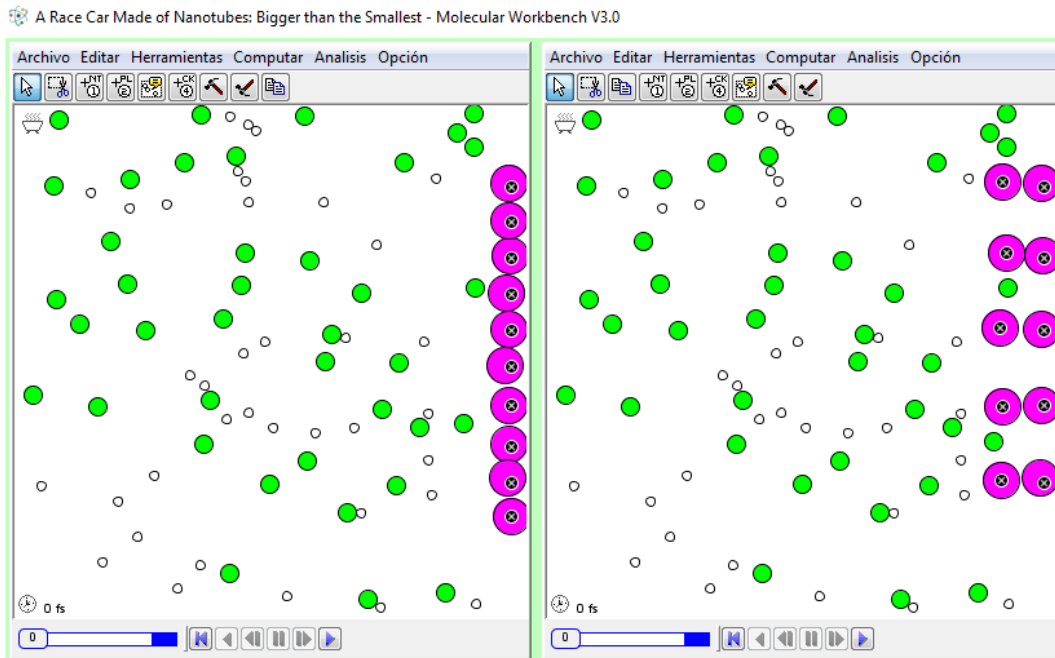
El comportamiento de adhesión de un átomo mucho más grande que una nanopartícula formada por átomos más pequeños es único y reproducible. Si fuera a realizar un experimento, debería poder observar una frecuencia peculiar debido al movimiento oscilatorio del átomo más grande en una cara lateral de la nanopartícula.

Figura 36. Comportamiento oscilatorio de la adhesión en una superficie de nanopartícula



➤ **Filtros activos y área de superficie**

Figura 37. Filtros activos y área de superficie



Éste es un modelo de dos maneras de limpiar con un filtro una toxina (las moléculas verdes) del aire (el blanco). Las moléculas púrpuras hacen un filtro activo que tienen una atracción fuerte y específica para la toxina. La concentración de la toxina en el aire disminuye mientras se pega al filtro, entonces se baja mientras el filtro se satura. Los dos modelos son idénticos, excepto por la disposición de las moléculas en el filtro. Mientras el modelo corre, el usuario puede visualizar que uno de los filtros elimina más de la toxina fuera del aire, porque tiene un área de superficie mayor. En la vida real, el carbón activado es un buen filtro de esta clase porque tiene una mayor área de superficie (está lleno de poros diminutos). El carbón realmente no necesita una atracción específica para las impurezas en filtrado fue justamente usada en este modelo para hacer él trabajo. Aparentemente fuerzas de van der Waal y los enlaces de hidrógeno son lo suficiente como para hacer que las cosas lo absorban. El carbón activado es usado en cosas como las máscaras de gas, los filtros de agua Brita, e incluso para remover cafeína de café. Aquí hay un micrograma de electrones de una partícula de carbón activado, donde puede visualizar los poros diminutos.

## Transistores: el futuro de los transistores

## ¿Los transistores pueden ser incluso más pequeños, más rápidos, y más energéticamente eficientes?

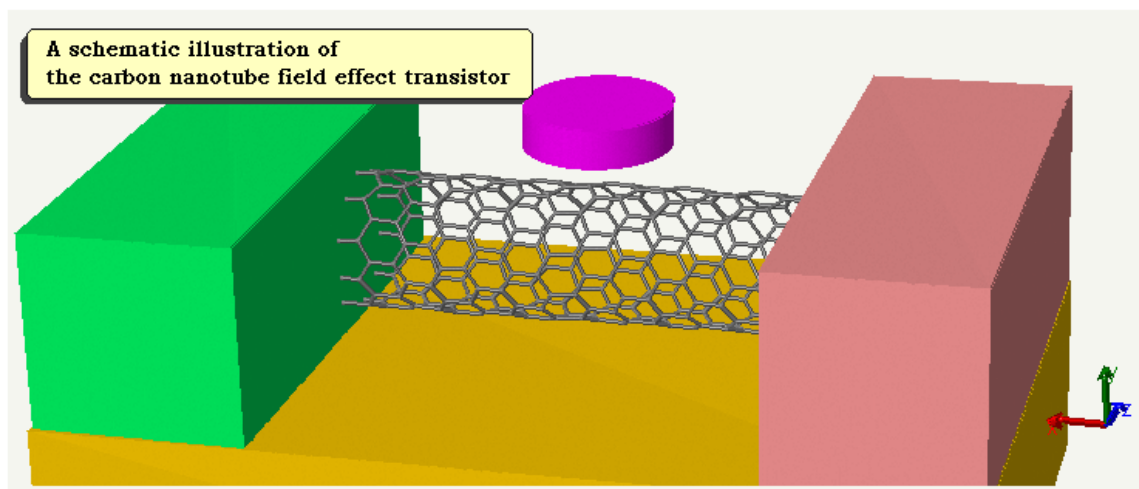
Los transistores están volviéndose más y más pequeños. Con el adelanto de la nanotecnología de punta, los científicos y los ingenieros exploran métodos para crear transistores incluso más rápidos que harán a las computadoras aún más poderosas.

El transistor de efecto de campo del nanotubo de carbono

Entrando al mundo del nanotamaño, el efecto cuántico se vuelve de suma importancia. Cómo hacer uso de mecanismos cuánticos para diseñar mejores transistores es uno de los campos de investigación más activos y excitantes de hoy. El transistor de efecto de campo del nanotubo de carbono (CNTFET), que es mostrado debajo, es un ejemplo que muestra gran potencial. Cuando los electrones se mueven dentro de un nanotubo de carbono, su comportamiento es enteramente diferente de cuando se mueven dentro de un semiconductor basado en silicio. Esta diferencia, que es atribuida a la naturaleza cuántica de electrones dentro de un nanotubo, deja al CNTFET funcionar 1,000 veces más rápido que cualquier transistor basado en silicio.

Figura 38. El transistor de efecto de campo del nanotubo de carbono

A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



**Transistores: Introducción**

El transistor es considerado una de las máximas invenciones del siglo 20. ¿Qué lo hace tan importante?

Los transistores son los bloques de construcción de los dispositivos electrónicos modernos. los celulares y computadoras todas dependen de ellos para funcionar. Gracias a la tecnología de micro fabricación de hoy, los transistores pueden ser hechos de tamaño super reducido y producido masivamente. Usted está probablemente usando millones de ellos al trabajar en esta actividad en este momento, un microprocesador de Intel dual core contiene 1.7 billones de transistores. El transistor de efecto de campo es el tipo más común de transistor. ¿Qué exactamente hace un transistor de efecto de campo? La respuesta es que puede ser utilizado como un interruptor para controlar corriente eléctrica.

Figura 39. Una CPU tiene billones de transistores



### **Como funciona un switch eléctrico ordinario.**

#### **Cómo unas obras comunes del apagador**


Un apagador mecánico contiene una parte móvil que puede conectar o puede desconectar un circuito, dejando electrones fluir o no.

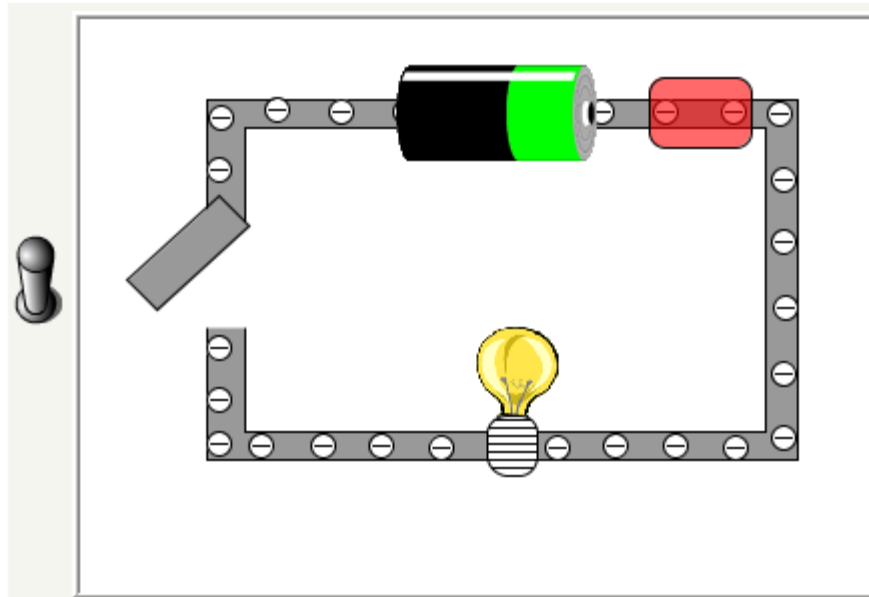
Note que la simulación es sólo una vista simplificada de una corriente eléctrica. En realidad, los electrones rebotan fuera de los átomos al azar y sólo "van a la deriva" lentamente en sentido contrario a un campo eléctrico. Al hacer clic se visualizara cómo los electrones se mueven entre una



sección de los alambre rojo y entonces encienda el interruptor/hacia sede clara ventaja en el movimiento del electrón.

Figura 40. Como funciona un switch eléctrico ordinario\_Los transistores como interruptores

 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0




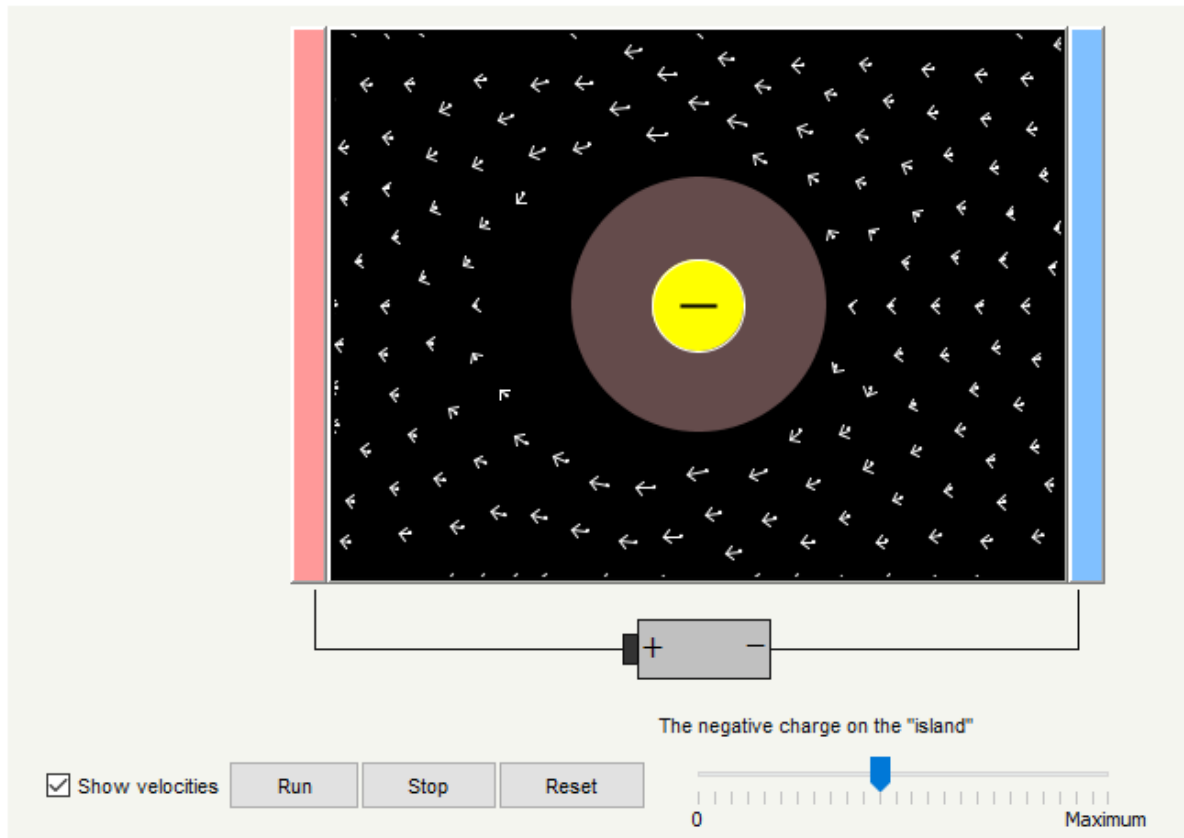
Los transistores como interruptores. Las únicas instrucciones que comprenden las computadoras son las señales eléctricas que son encendidas y apagadas como en el circuito de arriba. Por tanto, no tienen partes en movimiento y están encendidos y estropeados por señales eléctricas. Por lo tanto, el proceso conmutativo puede ser muy rápido – la frecuencia puede alcanzar 100 millardos de veces por segundo. Ningún interruptor mecánico puede alcanzar velocidad de esta magnitud. Y aunque pudieran, se desgastarían rápidamente. Los transistores no tienen este problema de desgaste.

### **Transistores: El Efecto de Campo**

Las corrientes eléctricas son afectadas por campos eléctricos. Éste es llamado el efecto de campo.

Figura 41. Las Corrientes eléctricas son afectadas por campos eléctricos. Éste es llamado el efecto de campo

 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



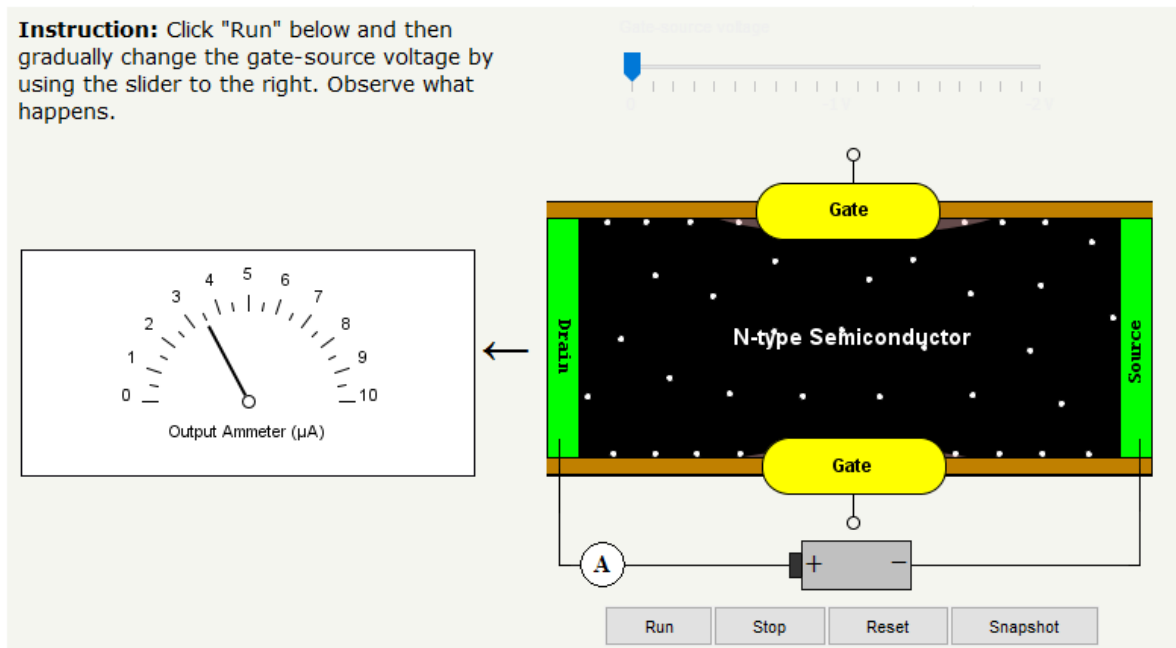
Los campos eléctricos no sólo conducen, sino que también pueden obstruir, el flujo de electrones. La simulación muestra esto. Los electrones en un material son conducidos por una batería. **El círculo amarillo representa un área cargada negativamente la cual se le llamara en este ejemplo la "isla"** incorporada en el material. Los puntos representan electrones, y las flechas en ellos representan sus velocidades. El círculo rosado aproxima la "zona prohibida" en la cual los electrones son sacados a la fuerza. Instrucciones: 1) Clic en el botón "Run" y observe el flujo de electrones. 2) Ajuste el dispositivo deslizante para ver cómo la carga negativa en la "isla" afecta el flujo.

### **Transistores: El Transistor de Efecto de Campo de Unión**

El transistor de efecto de campo de unión es el tipo más simple de transistor de efecto de campo. ¿Cómo funciona?

Figura 42. ¿Cómo funciona El Transistor de Efecto de Campo de Unión?

A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



En el ejemplo anterior ha visto que una "isla (se refiere a la figura anterior del círculo amarillo representa un área cargada negativamente)" cargada negativamente puede actuar como un obstáculo para el flujo de electrones a través de su campo eléctrico. Con un trazado diferente en cuál la "isla" cargada esta sobre la superficie de un semiconductor (por lo fácil de confeccionar), un transistor de efecto de campo de unión (JFET) puede hacerse. Un transistor de efecto de campo de unión consiste en tres terminales: la fuente, el desagüe, y el portón (una "isla" cargada). Los electrones se mueven hacia el transistor desde la fuente y se mueven fuera en el desagüe a través de la generalidad de un semiconductor saturado (ya sea P-Type o N-Type) entre ellos (el área negro en la simulación).

Un voltaje puede ser aplicado al portón para controlar la corriente. El portón debería estar hecho del tipo de semiconductor saturado.


### Transistores: El operador booleano AND

Los transistores son de mucha utilidad porque pueden usarse para construir computadoras digitales. En esta opción de Molecular Workbrech se muestra un operador booleano AND construido de dos transistores de efecto de campo.


Definición: Una puerta lógica es un modelo físico de una función Booleana – realiza una operación lógica en una o más entradas lógicas y produce una sola salida lógica. no se confunda con el portón de un transistor, que controla un solo transistor.

La siguiente simulación es una versión simplificada de un operador booleano AND de un circuito digital que toma aportes de los portones de dos transistores y realiza una operación AND lógica.

Tabla 7 Transistores: El operador booleano AND

 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0

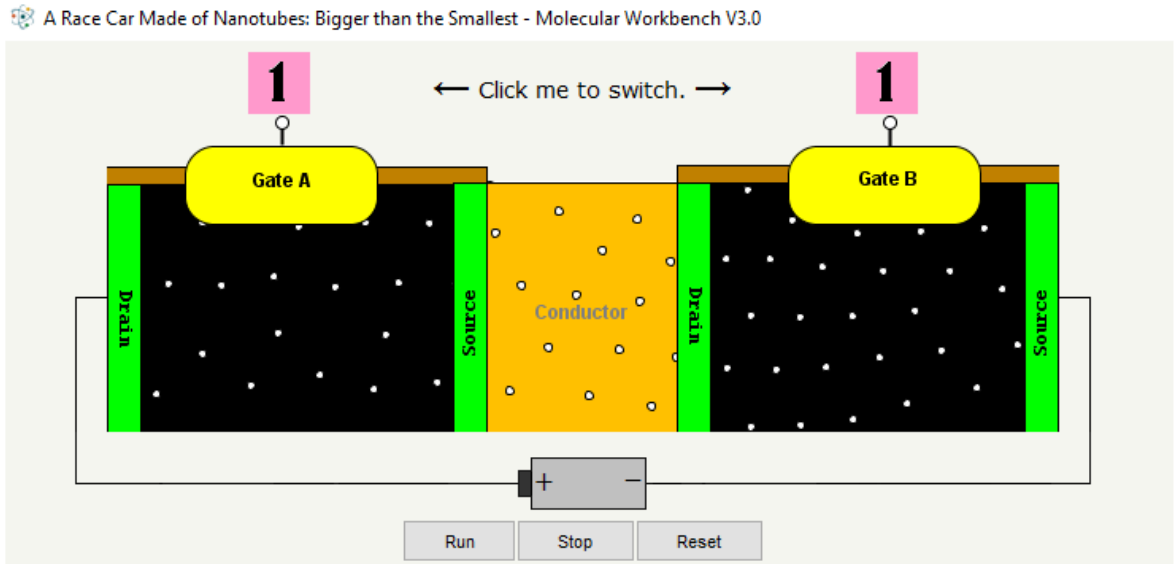
Symbol



Input		Output
A	B	A AND B
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

Las entradas pueden ponerse para tener "1 " o "0": "0" significa un voltaje bastante grande para represar el flujo; "1" significa ningún voltaje. El desagüe del transistor izquierdo está conectado a la fuente a través de un alambre conductor. La salida de este operador booleano AND depende de que haya un flujo de corriente continuamente. Si es sí, es "1". De otra manera, es "0".

Figura 43. Transistores: El operador booleano AND



### Transistores: la puerta logica OR

Hay una variedad de compuertas logicas. En esta página, usted explorará la compuerta logica OR.

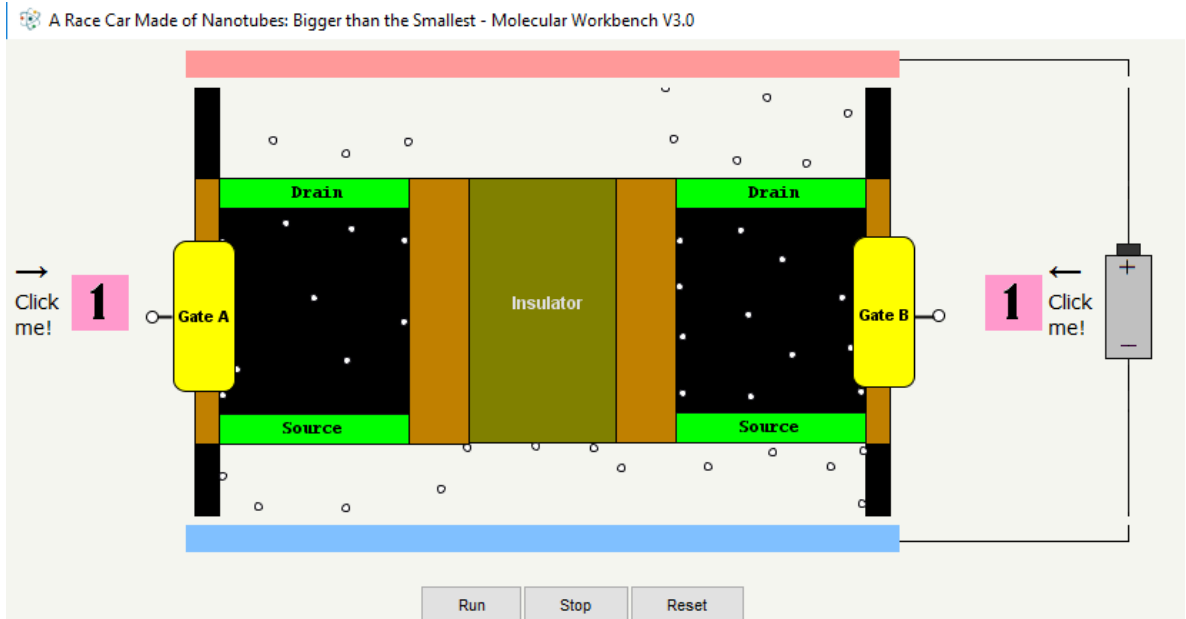
Tabla 8. Transistores: la puerta logica OR

A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3

Input		Output
A	B	A OR B
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

La siguiente simulación es una versión simplificada de compuerta logica OR que toma entrada de los portones de dos transistores y realiza una operación lógica OR (vea la tabla). Las entradas pueden estar colocadas para tener "1" o "0". La salida de esta compuerta OR depende de si hay o no un flujo de corriente continuamente del fondo hasta el tope, a través ambos o cualquier transistor. Si es sí, es "1". De otra manera, es "0".

Figura 44. Simulación es una versión simplificada de compuerta logica OR



## Transistores: El Transistor de Efecto de Campo MOS

El transistor de efecto de campo MOS (MOSFET) es con mucho el transistor más común. Su operación Y estructura es diferente al JFET.

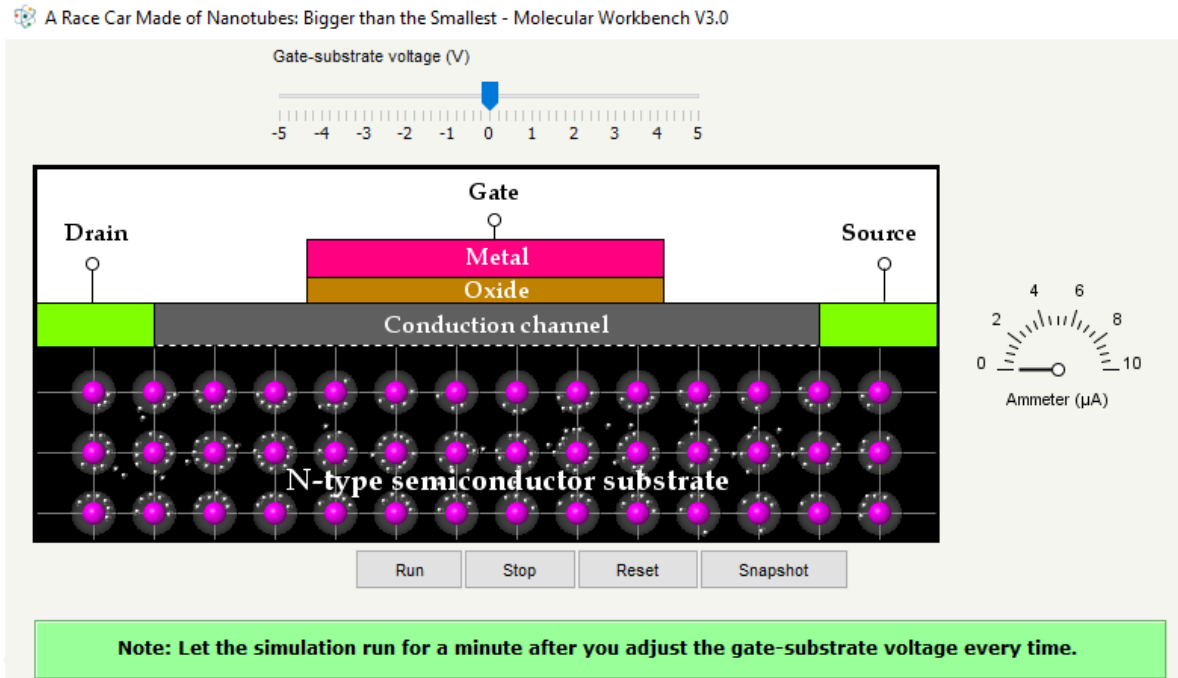
El MOSFET se caracteriza por una estructura de semiconductor de óxido de metal, que se hace típicamente cultivando un estrato de dióxido de silicio encima de un sustrato de silicio (el semiconductor) y depositando una capa metálica. El dióxido de silicio aísla el metal del sustrato de silicio.

Cuando un voltaje es aplicado a través de una estructura MOS, la distribución de transportadores de carga en el sustrato semiconductor cambia. Para un Semiconductor de Tipo N, si el voltaje del portón está más bajo que el voltaje del sustrato, entonces los electrones estarán forzados fuera el canal de conducción y la corriente de la fuente para el desagüe será cerrada. Inversamente, si el voltaje del portón está más alto que el voltaje del sustrato, entonces los electrones serán

atraídos al canal de conducción y habrá una corriente de la fuente para el desagüe.

La siguiente simulación muestra cómo funciona un MOSFET. El usuario puede cambiar el voltaje del sustrato de portón usando el dispositivo deslizante para experimentar con la simulación.

Figura 45. Simulación muestra cómo funciona un MOSFET



### 3.1.2. Nanotecnología computacional con aplicación dinámica molecular software Visual Molecular Dynamics VMD

VMD (Visual Molecular Dynamics) (Humphrey et al., 1996) es un programa de visualización y análisis molecular diseñado para sistemas biológicos tales como proteínas, ácidos nucleicos, conjuntos de bicapa lipídica, etc. Es desarrollado por el Grupo de Biofísica Teórica y Computacional Universidad de Illinois en Urbana-Champaign. Entre los programas de gráficos moleculares, VMD es único en su capacidad para operar eficientemente en trayectorias de dinámica molecular de muchos gigabytes, su interoperabilidad con un gran número de paquetes de simulación de dinámica molecular y su integración de información de estructura y secuencia.

Las características clave de VMD incluyen:

- Visión molecular 3-D general con los métodos extensivos de dibujo y coloración
- Sintaxis extensa de la selección del átomo para elegir subconjuntos de átomos para la exhibición
- Visualización de datos moleculares dinámicos
- Visualización de datos volumétricos
- Soporte para la mayoría de los formatos de archivo de datos moleculares
- No hay límites en el número de átomos, moléculas o tramas de trayectoria, excepto la memoria disponible
- Comandos de análisis molecular
- Representación de imágenes de moléculas de alta resolución y calidad de publicación
- Capacidad de hacer películas
- Construcción y preparación de sistemas para simulaciones de dinámica molecular
- Simulaciones interactivas de dinámica molecular
- Extensiones a los lenguajes de scripting Tcl / Python
- Código fuente extensible escrito en C y C ++

(Anexo 3)



### 3.1.3. Nanotecnología computacional software Rasmol2

RasMol2 es un programa de gráficos moleculares que permite la visualización de proteínas, ácidos nucleicos y moléculas pequeñas. Este programa está ideado para hacer posible la visualización, la enseñanza y la producción de imágenes con calidad de publicación. RasMol es compatible con los siguientes sistemas operativos y arquitecturas: Microsoft Windows, Apple Macintosh, sistemas UNIX Y VMS. Las versiones UNIX y VMS requieren un visualizador de color X Windows de 8, 24 (X11R4 o posterior). La versión X Windows de RasMol proporciona soporte opcional para una caja de mandos en hardware y comunicación mediante memoria compartida y acelerada. (vía XInput y las extensiones de MIT- SHM) si es que están disponibles en el X Server en uso.

El programa lee archivos de coordenadas moleculares y muestra interactivamente la molécula en la pantalla en una serie de esquemas de colores y de representaciones moleculares. Los archivos de entrada incluyen, específicamente, los formatos Brookhaven Protein Databank (PDB), Tripos Associates' Alchemy y Sybyl Mol2, Molecular Design Limited's (MDL) Mol, Minnesota Supercomputer Centre's (MSC) XYZ (XMol), CHARMM, formato CIF y archivos mmCIF. Si la información sobre conectividad no está contenida en el archivo, RasMol la calculará automáticamente. Actualmente las representaciones disponibles incluyen estructuras de alambre con profundidad (wireframe), bastones, esferas de espacio relleno (CPK), bolas y bastones, cintas biomoleculares (bien lisas sólidas y sombreadas, bien alambres paralelos) etiquetas de átomos y superficies de puntos. Los átomos pueden ser también etiquetados con cualquier texto. Confórmeros alternativos y modelos NMR múltiples pueden ser coloreados específicamente y etiquetados sus átomos. Diferentes partes de la molécula pueden representarse y colorearse independientemente del resto de la molécula o visualizados simultáneamente en diferentes formas. La molécula exhibida puede ser girada, desplazada, ampliada (zoom) y/o cortada en rebanadas interactivamente usando, bien el ratón, bien las barras de desplazamiento de windows, o bien la línea de comandos de la caja de órdenes adjunta. RasMol puede leer una sucesión de comandos previamente preparada en un archivo de **script** (guión) (o vía comunicación interactiva) para permitir cargar una imagen dado o un punto de vista concreto, de forma rápida. RasMol también puede crear un archivo **script** conteniendo los comandos requeridos para regenerar una imagen en uso. Finalmente, la imagen generada podría exportarse en una variedad de formatos incluyendo GIF, PPM, BMP, PICT, archivos de salida Sun o como un **script** MolScript o Kinemage. (Anexo 4)

#### 4. TRABAJOS REALIZADOS POR OTROS USUARIOS EN DISEÑO, DESARROLLO Y APLICACIÓN DE NANOSENSORES

##### 4.1. INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO DE NUEVA METODOLOGÍA DE DISEÑO BASADA EN PATRONES DE CÉLULAS MADRES, Y CONTROL MECATRÓNICO DE UNA PRÓTESIS BIOELÉCTRICA DE MIEMBRO INFERIOR PARA DISCAPACITADOS DE LA VIOLENCIA EN COLOMBIA, UTILIZANDO CLONACIÓN ARTIFICIAL

Ph.D. Antonio Faustino Muñoz, Ing. Mariela Muñoz  
Laboratorio de Computo Especializado-LCE, Universidad de Autónoma de Bucaramanga y Universidad del Cauca, Colombia

##### Resumen

El presente trabajo contempla la investigación y el desarrollo de una nueva metodología basada en patrones de células madres y control mecatrónico de una prótesis bioeléctrica de miembro inferior para discapacitados de la violencia en Colombia; equipándolo con un sistema de adquisición de datos que tome las señales de su par biológico y luego sean replicadas en la prótesis usando técnicas de inteligencia artificial. En esta investigación la metodología pretende romper con el paradigma clásico de diseño desde la concepción del problema hasta su posterior desarrollo.

##### Introducción

A lo largo de la historia de la humanidad, los problemas de discapacidad han venido afectando personas sin discriminar su edad o condición social. La historia de las prótesis nace con la necesidad funcional de integridad. Las prótesis fueron creadas para función, apariencia cosmética, etc. Personas con amputaciones existen desde hace años atrás.

La metodología hace parte fundamental de un proyecto de investigación, por ende en este trabajo se busca hallar una estrategia metodológica que conlleve a un enfoque novedoso y adecuado desde el punto de vista mecatrónico.

El plan de trabajo considera las siguientes actividades para la realización del objetivo general. En esta investigación la metodología pretende romper con el paradigma clásico de diseño desde la concepción del problema hasta su posterior desarrollo. El siguiente cuadro refleja el procedimiento a seguir para obtener el

modelo experimental; se desarrollaran algunas actividades complementarias necesarias para lograr llevar a cabo el proceso de investigación y obtención de resultados.

Figura 46. Metodología de desarrollo del proyecto



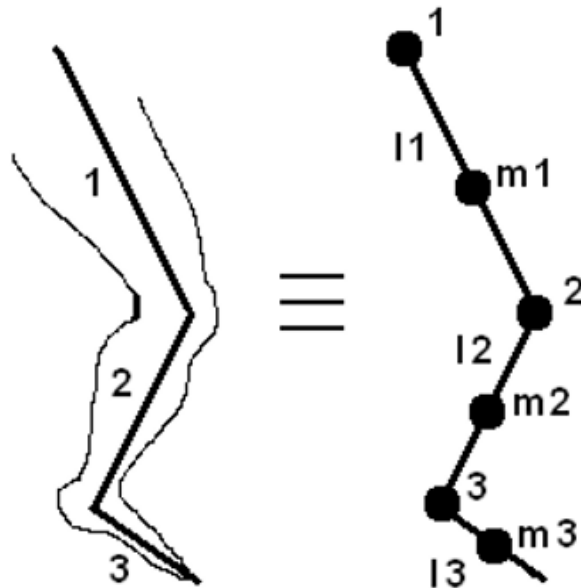
### **Análisis cinemático extremidad inferior**

Es esta la etapa fundamental del trabajo, acá se realiza el estudio de la anatomía y morfología de la extremidad inferior; esto con el fin de conocer y llegar a una familiarización con los patrones de movimiento y las variables físicas (desplazamiento, velocidad angular, ángulos juntas, torque o momento, etc).

Después de realizado el estudio de la anatomía, el siguiente paso consiste en hacer un análisis cinemático y cinético de la extremidad inferior, para ello existen diversos modelos propuestos por autores e investigadores reconocidos a nivel mundial.

Existe una aproximación muy interesante y valedera formulada por Winter conocida como modelo de unión de segmentos equivalente al modelo anatómico de la extremidad inferior como se ilustra a continuación:

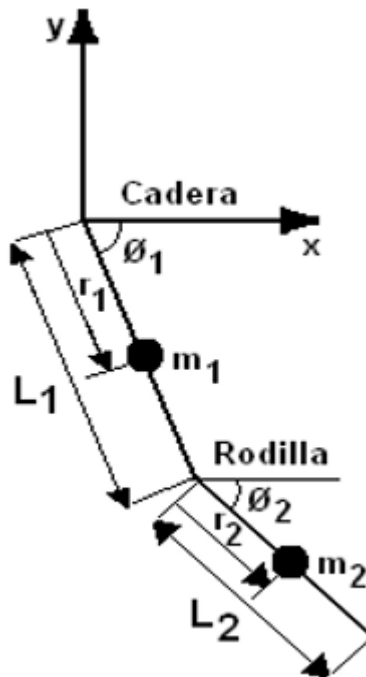
Figura 47. Relación modelo anatómico y modelo de unión de segmentos



Para realizar este modelo son necesarias medidas precisas de segmentos de masa, centros de masa, centros de las articulaciones y momentos de inercia. Todas estas variables pueden ser obtenidas de presentaciones estadísticas basadas en estatura, peso y algunas veces en sexo. Un número limitado de estas variables puede ser medido directamente con procedimientos que demandan bastante tiempo y con precisión limitada. A pesar de que existen muchas datos antropométricos disponibles, para un mejor análisis se hacen las siguientes suposiciones: Cada segmento tiene una masa fija localizada en un centro de masa (que no es más que el centro de gravedad en posición vertical). Entonces la localización de cada segmento de centro de masa permanece fija durante el movimiento.

Las articulaciones son consideradas juntas de rotación y las longitudes de los segmentos permanecen fijas durante el movimiento. Como se observó en la figura 2  $m_1$ ,  $m_2$  y  $m_3$  son las masas concentradas de cada segmento y  $L_1$ ,  $L_2$  y  $L_3$  son las longitudes respectivas de cada segmento. Se elige un modelo para el análisis de la prótesis. Para el análisis de la extremidad inferior durante el proceso de la marcha humana, se debe tomar en cuenta las dos fases más importantes durante el proceso de la marcha humana, la fase de balanceo y la fase de apoyo, a continuación se muestran los modelos a tomar para cada una de las etapas.

Figura 48. Péndulo doble fase oscilación



Para esta fase, la extremidad inferior se asume como un péndulo doble debido a que la misma oscila libremente sin influencia del tronco. En la figura del Péndulo doble fase oscilación,  $L_1$  y  $L_2$  son longitudes de los segmentos,  $r_1$  y  $r_2$  son las distancias entre el centro de masa y la articulación,  $m_1$  y  $m_2$  son los centros de masa de cada segmento y  $\theta_1$  y  $\theta_2$  son los respectivos ángulos para cada una de las articulaciones.

En esta etapa, se presenta triple péndulo invertido, pues hay una interferencia significativa del tronco en esta fase de la marcha. En la figura 29, al igual que en la anterior;  $L_3$ ,  $L_4$  y  $L_5$  son longitudes de los segmentos,  $r_3$  y  $r_4$  y  $r_5$  son las distancias entre el centro de masa y la articulación;  $m_3$ ,  $m_4$  y  $m_5$  son los centros de masa de cada segmento y  $\theta_3$ ,  $\theta_4$  y  $\theta_5$  son los respectivos ángulos para cada una de las articulaciones. En el modelo, los centros de masa de la extremidad inferior están concentrados en los centros de gravedad de cada uno de los segmentos y las masas de las articulaciones son despreciadas. Las coordenadas de referencias para la articulación de la cadera durante la fase de oscilación son fijas y lo mismo ocurre para la articulación del tobillo durante la fase de apoyo.

### Implementación en Hardware

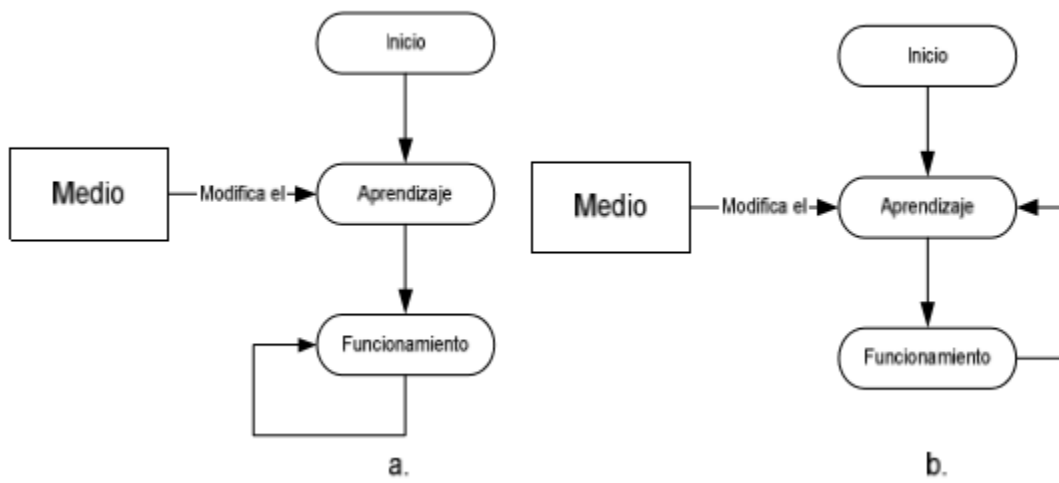
La metodología anteriormente mencionada, es de gran importancia, pero es evidente que precisa de un elemento físico, debido a esta necesidad, es imperioso

aplicar la metodología a un hardware que permita su aplicación, tanto en la parte de aprendizaje (si se desea que este se haga directamente en el hardware) como su ejecución y reaprendizaje, para este objetivo, es necesario implantar el denominado hardware evolutivo.

EL hardware evolutivo, es una herramienta necesaria para la implementación de la clonación artificial en ingeniería, las razones que fundamentan esta afirmación son varias, una de las más importantes, radica en la necesidad de aprendizaje del sistema, es evidente que el equipo desarrollado, sea sensor o controlador, va a funcionar por una cantidad de tiempo indeterminado, que en la mayoría de los casos se espera que sea un tiempo prolongado. Debido a esta situación es necesario prever que las condiciones, en las que fue "educado" el dispositivo, cambian o evolucionan, adicionando nuevas variables al proceso, lo que requeriría una adaptación del clon a su nuevo ambiente.

La adaptación que es requerida, no se puede lograr utilizando la metodología que se aprecia en la figura 30(a) en donde se observa que el aprendizaje sólo ocurre en un primer momento y que el proceso de ejecución o funcionamiento no es modificado en ninguna etapa. La siguiente concepción es permitirle al dispositivo la "reeducción" por medio de un aprendizaje que no necesariamente sea constante, pero si periódicamente, lo que facilitará la adaptación a nuevos cambios en el medio en el cual el clon trabaja, esta metodología se observa en la figura 30(b).

Figura 49. Tipos de funcionamiento



Para la implementación de un dispositivo o clon que aprenda periódicamente es posible que se haga de dos formas, "off-line" o "on-line", la primera de ellas consiste en detener el funcionamiento del clon, llevarlo a un laboratorio o unidad de aprendizaje e introducirle los nuevos parámetros vía software o hardware, el gran problema de esta concepción es que ciertamente se inducirán tiempos muertos en el funcionamiento del clon, es decir, el dispositivo estará fuera de funcionamiento cada vez que sea necesario (o el mismo dispositivo lo pida) un reaprendizaje, la totalidad de este tiempo será dada por la rapidez con la cual los encargados de realizar esta labor la cumplan, incluyendo factores humanos al proceso de aprendizaje, específicamente a los tiempos de los mismos.

En el aprendizaje "On-line", pasa todo lo contrario, el dispositivo, activa su función de aprendizaje cada cierto periodo de tiempo y lo ejecuta paralelamente a su funcionamiento, evitando el tener que detener el proceso en el cual el clon forma parte, posterior a un tiempo de aprendizaje, el clon puede modificar su estructura (Hardware evolutivo) para ya sea permitir la entrada de una nueva configuración que el mismo pueda suplir, o modificar totalmente su estructura.

En este caso en particular se desea implementar el uso del aprendizaje "On-line", para lo cual se ha estudiado muy de cerca el uso de células madres electrónicas, que al igual que sus homologas en la biología, estas células pueden convertirse en cualquier otro tipo de células dentro del cuerpo y a replicarse en una cantidad aun indeterminada de veces, lo que ha conllevado a los investigadores a interesarse en este de comportamiento y en ahondar en su estudio y evidentemente iniciar todo tipo de debates en el tema; afortunadamente las células madres que en esta investigación se utilizan distan sustancialmente de la polémica ética y moral, pero

aportan una valiosa información para el desarrollo de sistemas de alta tecnología, cerrando una nueva brecha entre la ciencia biológica y la ciencia tecnológica.

La célula madre que en este documento se desarrolla, es una unidad de procesamiento lógico digital, la cual, debido a su estructura puede modificar su comportamiento, gracias a la inclusión de una entrada denominada entrada de mutación, esta célula madre a diferencia de su homóloga en la naturaleza, no es capaz de replicarse a si misma, esta habilidad es reemplazada por la habilidad que poseerá el software para exigir la generación de nuevas células madres.

Para la implementación de este paradigma, es necesario contar con elementos que permitan una rápida y flexible configuración en hardware, para lograrlo utilizamos cualquier tipo de dispositivo lógico programable, en este caso en específico se utiliza un FPGA (Field Programmable Gate Array).

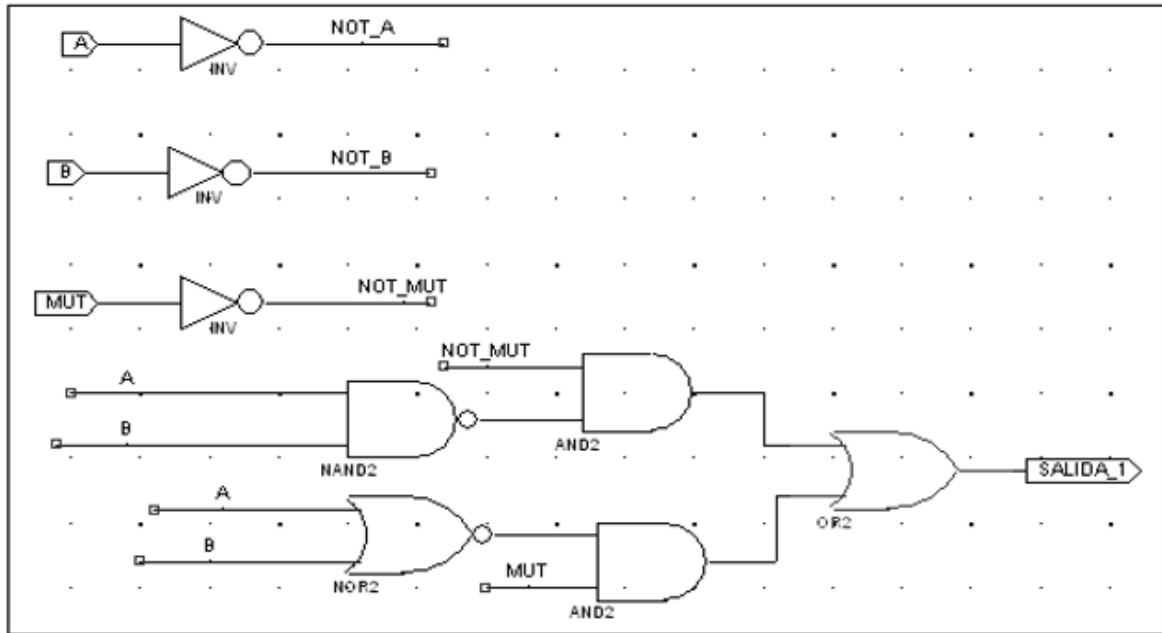
El diseño de circuitos digitales, entre los paradigmas ya propuesto se conocen los diseños de compuerta AND y OR y sus correspondientes inversores, NAND y NOR, con estos operadores básicos se puede diseñar cualquier clase de los circuitos lógicos existentes (OR, AND, XOR, NOT), por lo que estas 2 compuertas se pueden llamar las compuertas base de toda la lógica digital.

Centrando la atención en las compuertas NAND y NOR, la característica más importantes de estos operadores es que uno o cualquiera de los dos es el resultado de negar o invertir las entradas de señal del otro es por esto que el diseño del circuito evolutivo se enfocará en la implementación de estas dos compuertas.

Para este diseño se implementó una FPGA SPARTAN3 de XILINX que es muy comercial y de fácil acceso. El primer paso consiste en modelar la célula madre en la FPGA, debido a la sencillez del ejemplo, se trabaja en la modalidad "schematic" del software proporcionado por la compañía desarrolladora, esta visualización nos ayuda a observar y analizar de una mejor manera la célula madre. Posterior a esta selección es necesario implementar una compuerta NOR y compuerta NAND dentro del mismo circuito, en este caso en especial, se trabajarán compuertas de 2 entradas, para lograr el funcionamiento del circuito como célula madre, se debe incorporar una 3 entrada, la cual funcionará como operador lógico mutable entre la NAND y la NOR. El circuito se puede apreciar en la figura 31.



Figura 50. Hardware Evolutivo



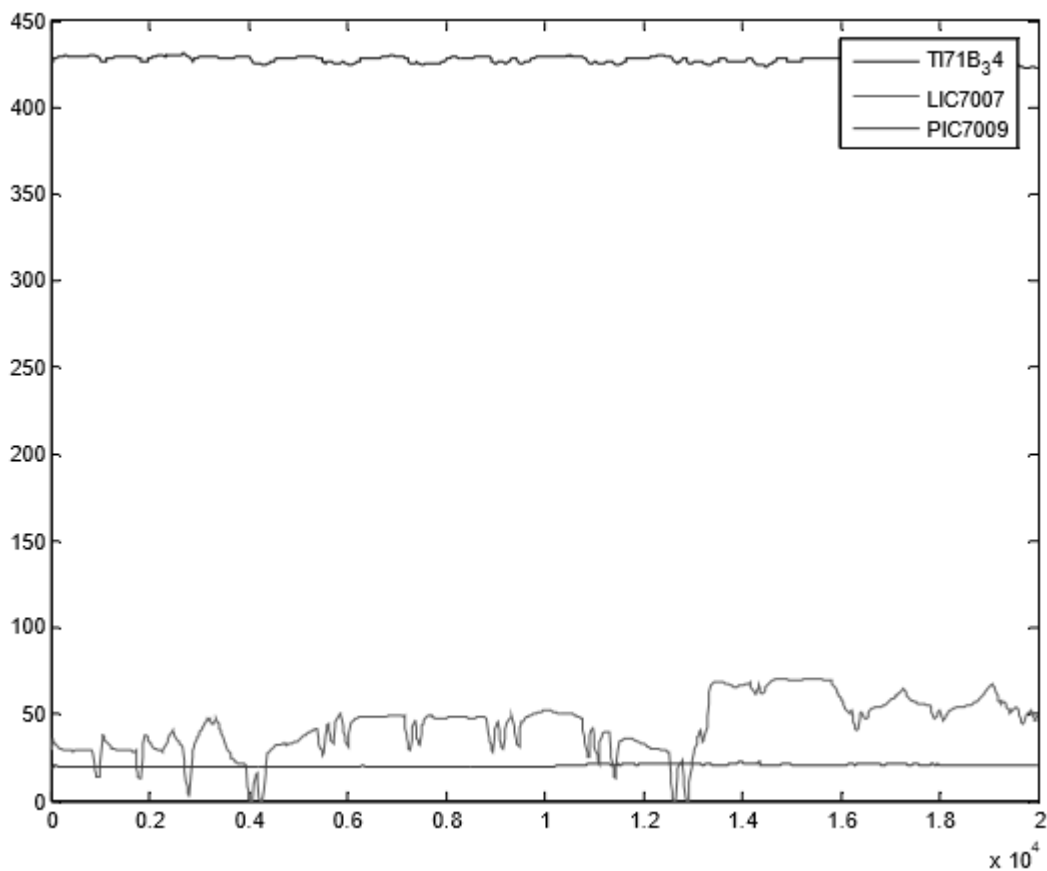
Como se puede observar, la célula madre puede trabajar tanto como NOR o NAND, dependiendo de su entrada de operador lógico mutable, lo que permite, al implementar una amplia cantidad de estas células, el desarrollo de una alta variedad de aplicaciones, así como igual número de arreglos lógicos. Esto se aprecia en la siguiente tabla 5.

Tabla 9. Operaciones Célula madre

<b>A</b>	<b>B</b>	<b>Mutación</b>	<b>Salida</b>
0	0	0	1
0	1	0	1
1	0	0	1
1	1	0	0
0	0	1	1
1	0	1	0
0	1	1	0
1	1	1	0

El software utilizado para la demostración de esta metodología empleo datos de las variables del miembro inferior (prótesis) tales como posición, velocidad, fuerza-torque, los cuales afectan una variable denominada desempeño, con estos datos se podrá trabajar para la demostración de la metodología, el software consta, además de las mismas etapas explicadas en este documento, el primer paso es identificar las señales y hacer un procesamiento, esto se observa en la figura 32, en donde se aprecia unas señales ya filtradas y listas para la implementación de la metodología.

Figura 51. Entradas del sistema



A las señales obtenidas anteriormente se les aplicó la metodología de clonación propuesta, sin conocer previamente las relaciones entre las variables de entrada y de salida.

Gracias a la metodología, se pudo encontrar una relación en algoritmos genéticos, con la modalidad fuzzygenético, que permita la inferencia de la salida, los resultados se aprecian en Figura 32 y Figura 33 la evolución de esta población (200 individuos) en 350 generaciones es evidente, en la Figura 33, en donde se encuentran las 3 primeras calificaciones de cada población, el criterio para detener el algoritmo genético fue dado por el tiempo máximo de ejecución (12hrs).

Figura 52. Clonada Vs Real

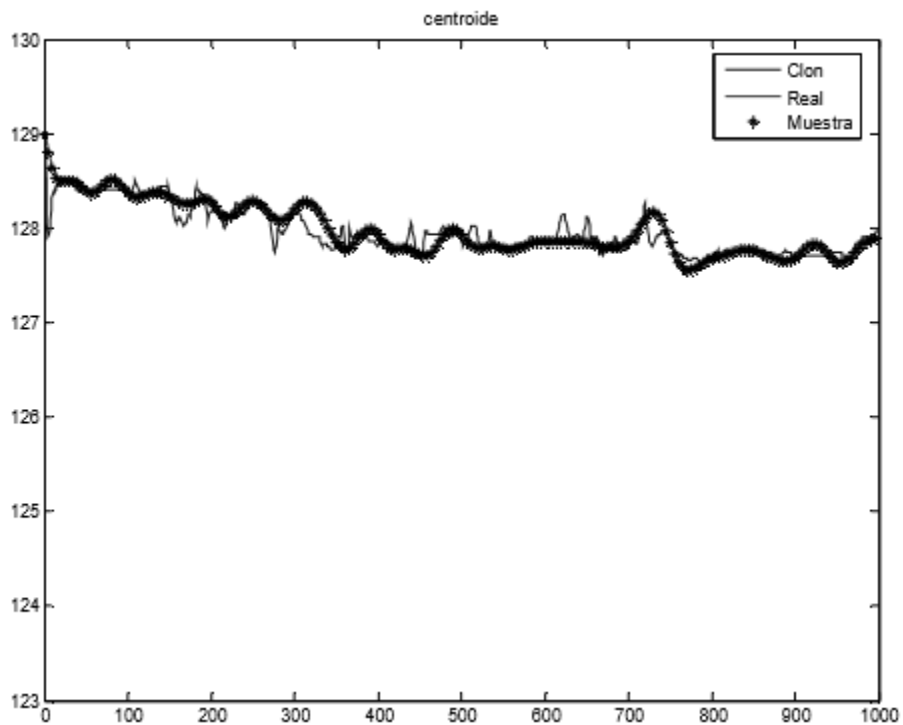


Figura 53. Error de Clonación

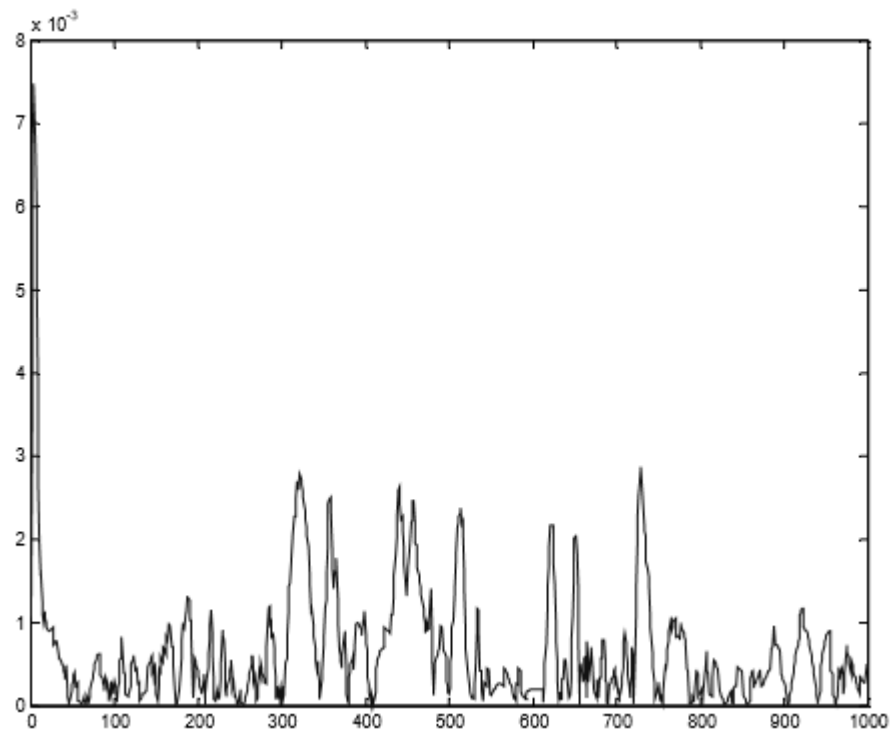
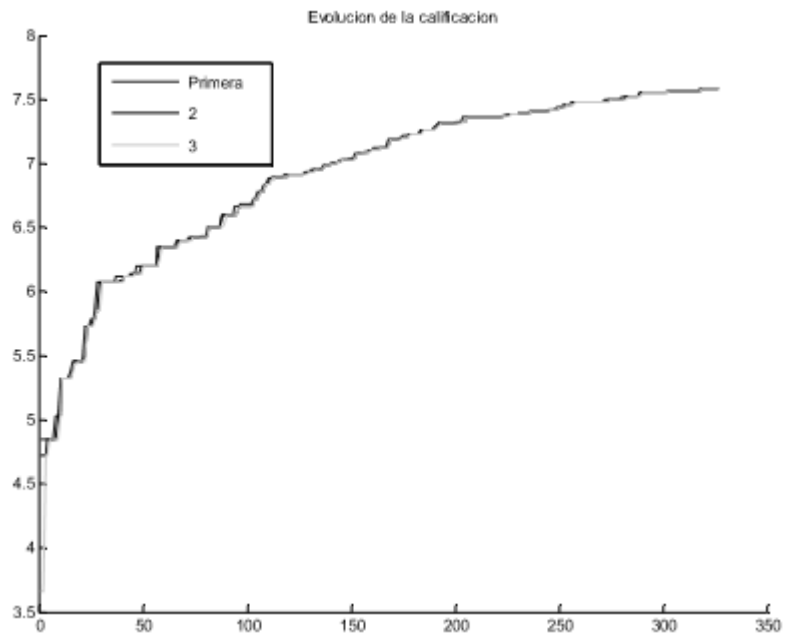


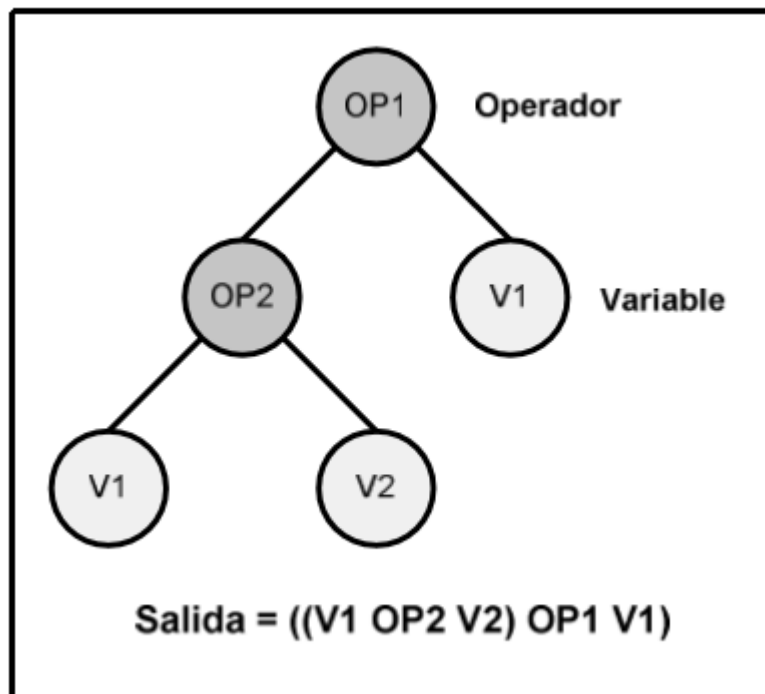
Figura 54. Evolución de la calificación



Como se puede observar, el máximo porcentaje de error obtenido es del 0.08%, y la media de esta medida es del 0.01% aproximadamente, lo que permite acercarnos a un sistema de alta precisión con costos inferiores a los requeridos para tal fin, confirmando que la metodología acá implementada no solo es válida para la obtención de clones en ingeniería reduciendo costos a la industria y optimizando los recursos de las mismas.

Árboles de decisión. En el desarrollo de la investigación se encontró otra concepción para la implementación de la metodología planteada, esta es denominada los árboles de decisión, los cuales se aprecian en la Figura 35, estos al igual que los cromosomas anteriormente explicados, contienen información que permite la solución de problemas tipo SISO (Simple input simple output) y MISO (Multiple input simple output), esta representación se puede complementar con el uso de AG's, que permitan la generación de múltiples árboles y la selección de las mejores expresiones, para su posterior cruce y generación de nuevas poblaciones de árboles de decisión, que a su vez, crean nuevas expresiones que buscan la solución o la representación de un modelo matemático del sistema físico analizado.

Figura 55. Árbol de decisión



Como se aprecia en la figura 35, un árbol de decisión esta conformado básicamente por dos tipos de unidades representativas, los operadores y las variables, los operadores se encuentran dentro del árbol, mientras que las variables se encuentran en el exterior del mismo, esta arquitectura permite la elaboración de expresiones que pretenden emular modelos matemáticos en busca de emular la salida del sistema. Algunos de los resultados aplicando esta técnica se aprecian en la figura 37 y en la figura 38, en donde se puede observar los resultados de aplicar árboles de decisión y AG's (1000 generaciones y un máximo de 5 niveles en el árbol); lo que permite encontrar valores de errores inferiores al 0.2%.

Figura 56. Gráfica de la señal objetivo

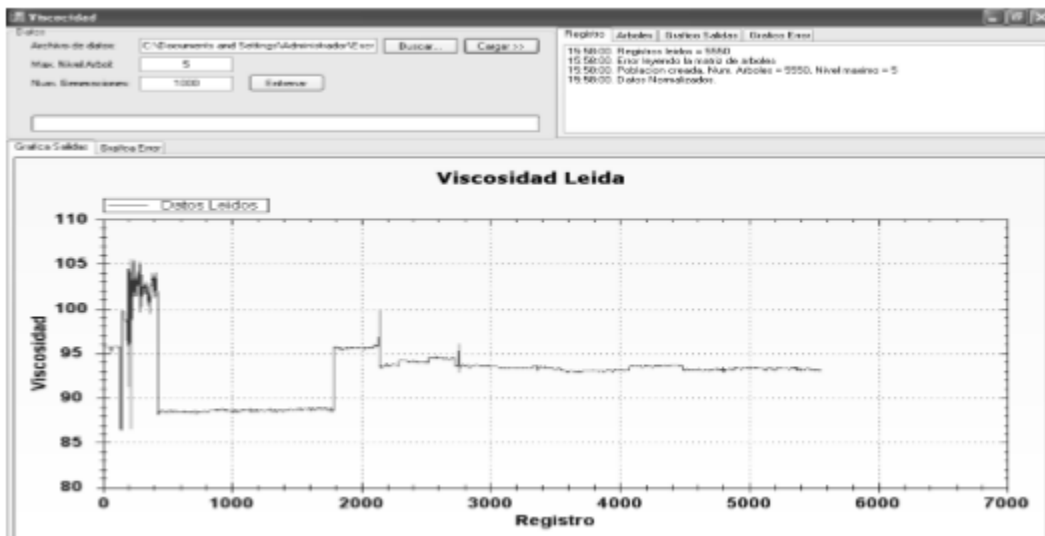
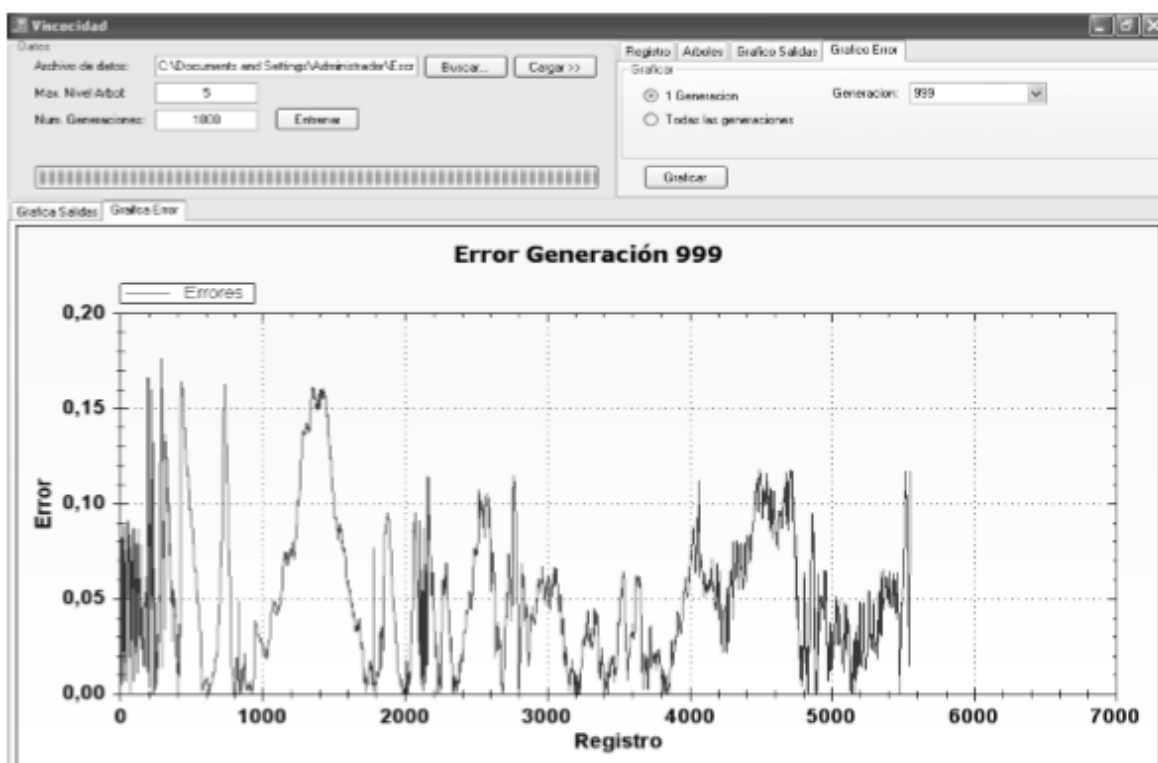


Figura 57. Gráfica del error



#### 4.2. DISEÑO, DESARROLLO Y APLICACIÓN DE NANOSENSOR TERMORRESISTIVO PARA UN PROCESO DE NANOCATALISIS EN REACTORES QUÍMICOS DE LA INDUSTRIA DEL PETRÓLEO. (ECOPETROL)

Propuesta de Investigación  
José Andrés Hernández Arce

#### Resumen

Los sistemas nanotecnológicos se aplican al diseño de ingeniería para la caracterización, producción, y aplicaciones de estructuras, dispositivos, sistemas en nanoescala, equivalente a la milmillonésima parte de un metro.

De acuerdo a Abricht et al (2004: 17) se pueden identificar esencialmente cuatro campos de la nanotecnología en los cuales confluyen diferentes disciplinas científicas y tecnologías y los cuales encuentran diversos sectores de aplicación:

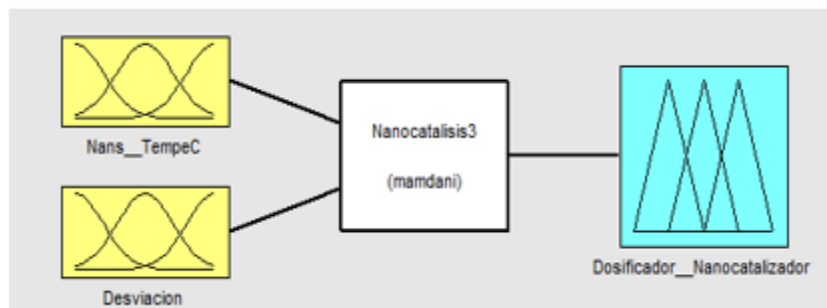
## Objetivos

- Diseñar estrategias avanzadas de aplicación de sistemas nanotecnológicos en Ingeniería, seleccionar los métodos de medición (nanosensor) y de accionamiento (nanoactuador) y evalúa su comportamiento a través de modelos a nanoescala.
- Realizar la modelación y simulación en tiempo real basadas en sistemas nanotecnológicos en Ingeniería y aplicar herramientas de diseño e implementación con métodos de fabricación Top Down y Bottom Up.
- Establecer con el uso de modelos MEMS con herramientas de COMSOL y soportes de nanocircuitos los modelos basados en la teoría cuántica y el mapa conceptual de acuerdo a la variante del estudio.
- Implementa en sistemas en tiempo real con el uso de modelos NEMS con herramientas de COMSOL, soportes de MATLAB.

**Metodología de investigación propuesta:** La Investigación de sistemas de control de temperatura utilizados por los procedimientos de producción es de gran utilidad para el monitoreo en tiempo real de la operación y el control de los procesos y reacciones, principalmente porque permite establecer las condiciones de su funcionamiento.

El modelo fuzzy ver Figura 39. es la encargada de almacenar los datos de los grupos que controlan las variables definidas. La definición de reglas hace referencia a la comparación por medio de un bloque MIMO (múltiples entradas múltiples salidas) debido a que se usan varias entradas, es decir varios sensores.

Figura 58. Sistema fuzzy integrado



**Rreferente teórico:**

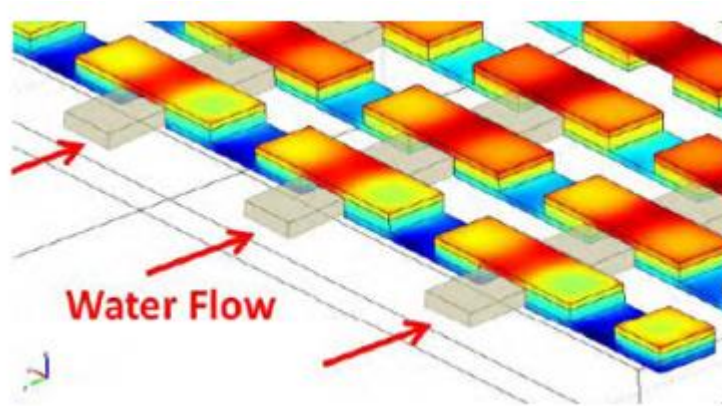


*Fundamento físico:* El cambio de la entalpia define rapidez de la reacción y por ello es principal mantener la energía calorífica en el rango óptimo para así tener una reacción más eficaz

*Sensor termorresistencia y calentador:* sus principios de funcionamiento se basan en el efecto de JOULES de metales y semiconductores, según el cual, su resistividad varía en función de la energía calorífica que tenga la resistencia, el material de que está hecho y el diseño adoptado.

Modelado: El desempeño y diseño (en el caso de la termorresistencia ver Figura 40) depende de las cantidades de flujo que pasa por la parte designada para el contacto.

Figura 59. Diseño de flujo vertical de la termocupla



Para el circuito de calentamiento el área a calentar no se tiene en cuenta para la simulación de calentador ya que está definido el tamaño de dispositivo y la simulación solo tomara una unidad de este, para su cálculo, pero aun así su cantidad de energía liberada puede ser variada dependiendo de la aplicación.

Se debe dibujar el circuito de calentamiento en la placa de vidrio ya creada  
La ecuación que gobierna eléctrica la operación del circuito es la siguiente:

$$\nabla_t \cdot (-d\sigma \nabla_t V) = 0$$

Donde:  $d$  es el grosor del gravado  $\sigma$  es la conductividad eléctrica  $\nabla_t$  es el gradiente de operación

$V$  es el potencial eléctrico

La siguiente resultante ecuación denota la transferencia de calor con las condiciones de frontera utilizadas para describir los flujos enfrente y atrás del resistor

$$\nabla \cdot (-k\nabla T) = 0$$

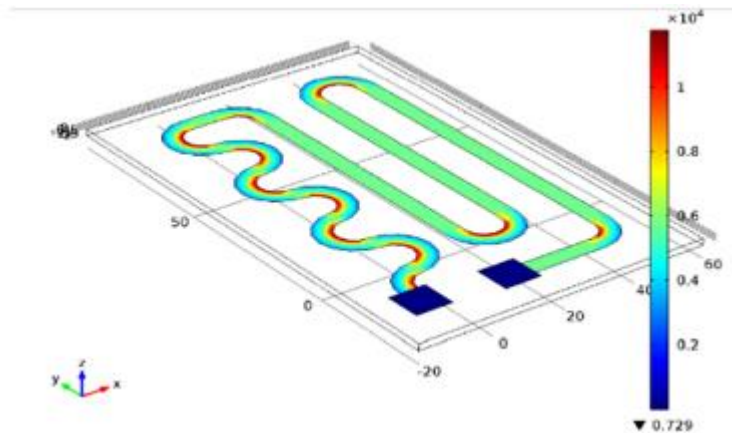
$$-\mathbf{n} \cdot (-k\nabla T) = q_0 + h(T_{\text{inf}} - T) - \nabla_t \cdot (-d_s k_s \nabla_t T)$$

**Donde:**

$n$  es el vector normal en la frontera.  $K$  es la conductividad térmica  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor de la película  $T_{\text{inf}}$  es la temperatura del medio exterior  $K_s$  es la conductividad térmica del gravado

Finalmente esto nos da las gráficas del mallado con respecto a la temperatura y la deformación causada en el circuito.

Figura 60. Imagen de distribución Termica del circuito  
Diseño y aplicación del control difuso



## Diseño y aplicación del control difuso

Se considera que si el catalizador debe mantener ciertas temperaturas para mantener su desempeño, Este tiende a gastarse lo cual causa que la reacción se pueda detener o ralentizar cosa que como resultado la lleva un punto de equilibrio donde la temperatura descende lo que significa que para contrarrestar esto se debe dar un dosis de catalizador en grandes cantidades, si la temperatura por otro lado se está saliendo de los limites la dosis de catalizador debe ser baja para que la reacción continúe en los rangos que sean más convenientes y permanezca en condiciones óptimas.

## Modelamiento Fuzzy

En el comportamiento se debe agregar los posibles errores que causan desviaciones en las mediciones ver Figura 41, 42 y por ende en la implementación del sistema de control, por ello se agrega esta variable en el sistema de lógica fuzzy.

Figura 61. Sistema fuzzy nanosensor

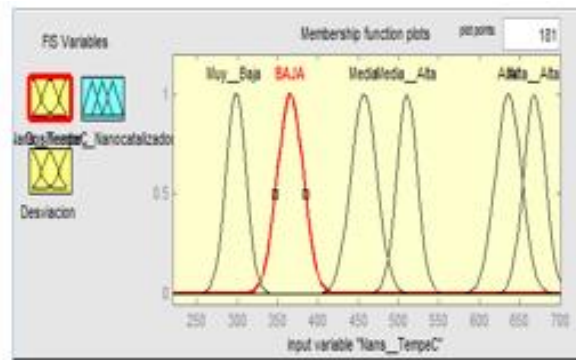
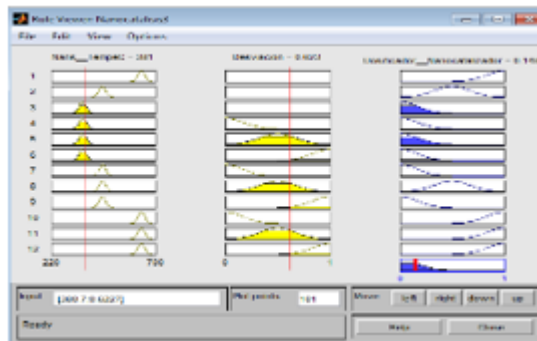


Figura 62. Rule viewer del sistema de control



#### 4.3. DISEÑO DESARROLLO Y APLICACIÓN DE NANO SENSOR DE VELOCIDAD EN EJES HOMOCINÉTICOS PARA EL MONITOREO Y REGISTRO EN CAJA NEGRA PARA AUTOMOTORES. (TRANSEJES)

Propuesta de Investigación

Jesús Ernesto Monsalve C,

##### **Resumen**

El siguiente trabajo se desarrolla como metodología para un sistema nanotecnológico por medio de sensor y actuadores con el fin de implementarlo en un eje homocinético que nos ayude a tomar datos y reducir el riesgo a la hora de un accidente.

##### **Objetivo**

Investigar, desarrollar y evaluar nuevos prototipos a escala nano de medios de automatización, control avanzado, inteligente y supervisión dotados de sistemas instrumentados de seguridad de ejes homocinéticos de nueva generación, que garantice alta productividad y calidad de los procesos de ensamble de los modelos de ejes establecidos.

##### **Metodología De Investigación Propuesta**

Figura 63. Transmisión en automotores con eje homocinético



Figura 64 Eje homocinético

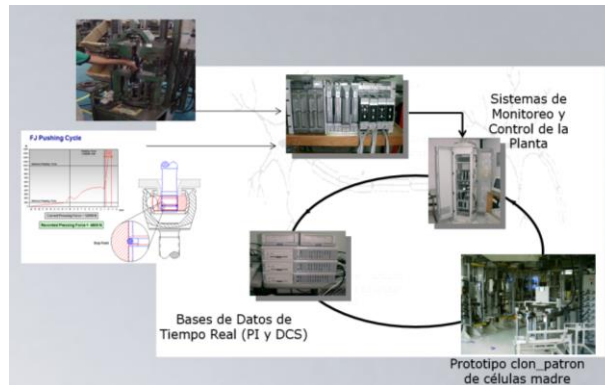
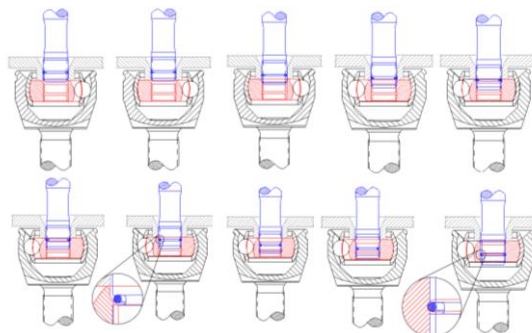


Figura 65. Eje homocinético (Proceso de Ensamble)



La zona fuzzy es la encargada de almacenar los datos de los grupos que manejan las variables definidas.

## Modelado fuzzy

Figura 66. Sistema fuzzy integrado

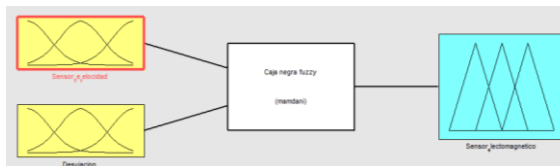
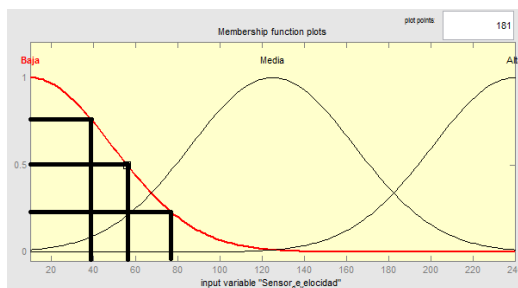


Figura 67. Sistema fuzzy nano sensor\_ Sistema fuzzy nano sensor (desviación)



**(Simulación de comportamiento)**

Tabla 10. Sistema fuzzy (resultados)

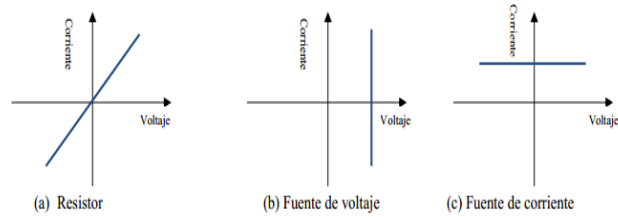
Particular	Membresia 0,25	Membresia 0,5	Membresia 0,75	Membresia 1
Baja	79	59	40	181
Media	79	90	160	-
Alta	179	200	220	-
Negativa	-0.81	-0.61	-0.41	-
Zero	-0.6	-0.4	0.23	0.4
Positiva	0.4	0.6	0.8	-
NoDesa	0.15	0.2	0.29	-
DesaMed	0.2	0.4	0.8	0.9
DesaAlta	0.7	0.78	0.85	-

**Tabla1. Sistema fuzzy (resultados)**

**Referente teórico**

*Fundamento físico:* Una de las características más importantes de los elementos, para describir su comportamiento, es la relación entre el voltaje y la corriente entre sus terminales; esta relación es conocida como la relación corriente – voltaje para un resistor está dada por la ley de Ohm:  $V= R \cdot I$  y su curva corriente voltaje es mostrada en la Figura, donde también se muestra la relación corriente voltaje para una fuente de voltaje ideal y para una fuente de corriente ideal.

Figura 68. Característica corriente-voltaje elementos de circuitos



Existen diferentes modelos para representar el comportamiento eléctrico de las celdas solares mediante la relación corriente - voltaje, muchos de ellos basados en la física y en parámetros que no son fácilmente conocidos (Villalva, Gazoli, & Filho, 2009). La relación entre la corriente ( $I$ ) y el voltaje ( $V$ ) de la celda solar está dada por la ecuación:

$$I = \frac{I_x}{1 - \exp\left(-\frac{1}{b}\right)} \left[ 1 - \exp\left(\frac{V}{bV_x} - \frac{1}{b}\right) \right]$$

Donde:

- $V_x$  es el voltaje de circuito abierto
- $I_x$  es la corriente de corto circuito del celda
- $b$  es una constante característica del celda

Si se conoce la potencia máxima, entonces la corriente requerida para suministrar dicha potencia en función del voltaje está dada por la ecuación:

$$I = \frac{P_{mpp}}{V}$$

#### 4.4. Diseño y desarrollo de sistemas de instrumentación inteligente para carreteras de la malla vial de Colombia (Corasfaltos)

Milciades Diaztagle Gómez

##### **Resumen**

Se hace necesario explorar a través de la instrumentación, el grado de correlación existente entre las técnicas utilizadas para efectos de diseño y los resultados obtenidos al llevar a cabo la aplicación de dichas determinaciones en la realidad, mediante el conocimiento exacto del comportamiento de las obras de ingeniería, frente a las solicitaciones a las que se ven sometidas durante su operación o servicio, verificando a escala real el desempeño de los materiales frente a variables como la humedad, deformación y la temperatura, entre otras. Esto es de fundamental importancia para establecer las condiciones de operación reales y determinar los factores que influyen en la duración y comportamiento de una obra de ingeniería, cuestión que a su vez, introduce mejoras en los métodos de diseño y caracterización de materiales, y provee mayores elementos de juicio para definir el momento en el que se debe dar inicio al proceso de conservación diferente al mantenimiento rutinario, evitando inversiones posteriores mayores y optimizando así los recursos económicos.

Para el análisis de los parámetros asociados a los pavimentos, se definieron las variables humedad, temperatura, deformación y tráfico vehicular en el que se aplicaron modelos para la evaluación del comportamiento y control de los sensores que miden estas variables. El procedimiento establecido para la instrumentación se validó a través del diseño del control inteligente que permite determinar los parámetros asociados al pavimento en tiempo real. Los sistemas de control inteligente serán diseñados y evaluados a través de modelos de simulación en Labview, Comsol y Matlab.

##### **Objetivo**

Diseñar y desarrollar sistemas de control inteligente del tráfico vehicular dotado de instrumentación de alta precisión para el monitoreo y control de parámetros asociados al comportamiento de carreteras de la malla vial de Colombia.

En este proyecto se propone diseñar un sistema de control inteligente difuso que permita integrar tarjetas de adquisición de datos de las señales de los sensores de humedad, temperatura, deformación y flujo vehicular como parte del sistema SCADA que genera alarmas sobre el estado de las vías y el comportamiento de los pavimentos.

La lectura de los sensores y multiplexación de los mismos ocurren en una zona donde todos los canales se unen en un solo canal para ingresar al



controlador difuso. En este orden el comportamiento de los sensores se almacenan en tiempo real en una base de datos. La zona fuzzy es la encargada de almacenar los datos de los grupos que controlan las variables definidas del pavimento. La definición de reglas hace referencia a la comparación por medio de un bloque MIMO (múltiples entradas múltiples salidas) debido a que se usan varias entradas, es decir varios sensores.

La herramienta de simulación LABVIEW utilizada como parte del sistema SCADA permite disponer de flexibilidad y facilidad de diseño de controladores difusos interactivos; bajo el entorno de esta herramienta se elaboraron interfaces gráficas con los complementos necesarios para implementar la lógica difusa en sistemas MIMO (múltiples entradas y múltiples salidas) y de monitoreo en tiempo real y almacenamiento de datos. De igual manera se trabajará con software COMSOL y MATLAB, los cuales me permitirán programar (visualización mediante un lenguaje de programación) y simular en repetidas ocasiones el comportamiento del sistema con cierta temperatura, humedad, deformación y tráfico vehicular al cual podría estar sometido, para dar lugar a la solución más adecuada.

**Diseño metodológico:** Los sistemas de control se implementan de acuerdo a una secuencia de pasos que permita lograr un modelo adecuado a las condiciones reales del comportamiento de los pavimentos, como caso de estudio se toma el proceso de medición y control de la temperatura, tráfico vehicular, deformación y humedad.

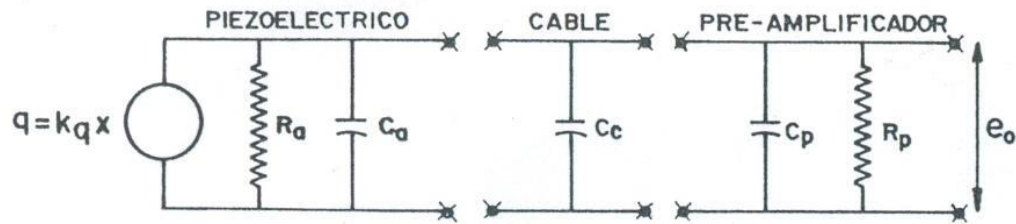
### **Diseño e implementación de los modelos de los sensores**

- *Modelo del Sensor para el control del tráfico vehicular basado en el método piezoeléctrico*

El efecto piezoeléctrico es reversible, por tal motivo el material sometido a la acción de cargas eléctricas tiende a deformarse. Para compensar el efecto sobre la sensibilidad en la medición es decir la alta impedancia de salida del elemento piezoeléctrico, es necesario un preamplificador con alta impedancia  $R_p$  resistiva de entrada.

Se ha inducido también la capacitancia  $C_c$  del cable entre el piezoeléctrico y el preamplificador y la capacitancia de entrada  $C_p$  del preamplificador. La resistencia del cable se desprecia debido a su pequeño valor, en la siguiente figura aparece el circuito de medición.

Figura 69. Modelo del Sensor para el control del tráfico vehicular basado en el método piezoeléctrico



Las tres capacitancias se suman y por lo tanto,

$$C = C_a + C_c + C_p \quad [F]$$

Para las resistencias se tiene,

$$R = (R_a * R_p) / (R_a + R_p) \quad [\Omega]$$

La impedancia resultante es la suma en paralelo de R y 1/C(s)

$$Z(s) = \frac{R}{1 + RC(s)}$$

La corriente que circula por el piezoeléctrico depende de la razón de cambio de la carga  $q$ .

$$i(t) = dq/dt = k_q (dx/dt)$$

$$i(s) = k_q * Sx(s)$$

El voltaje de salida se determina,

$$e_{o(s)} = i(s) * Z(s)$$

La constante de tiempo se incrementa si la capacidad C total aumenta, lo que influye sobre la sensibilidad del sistema. La única forma de elevar la constante de tiempo sin afectar la sensibilidad es obtener un elevado valor de resistencia eléctrica  $R_p$  en el preamplificador cuyo valor alcanza  $R_p = 4.5 \text{ G}\Omega$  en paralelo con  $C_p = 1 \text{ pF}$ . La sensibilidad estática depende de la constante  $K_q$  del generador de cargas, pero disminuye con la capacitancia total.

La capacitancia del piezoeléctrico y del preamplificador se controlan en la producción, pero la del cable depende de su longitud (95 pF/m es un valor típico para un cable de buena calidad); entonces, la sensibilidad depende de la longitud del cable lo que se considera en el análisis del modelo matemático, si es posible por cuestiones de espacio, el preamplificador se debe conectar junto al transductor, reduciendo a cero la capacitancia del cable. La sensibilidad estática resulta del cociente de 0,9 C/m, es decir, 0,9  $F^*(V/m)$  entre  $815 \cdot 10^{-12} F$ , siendo el resultado de  $1104 \cdot 10^6$  (V/m), es decir, 1104  $V/\mu m$ . La variación relativa en sensibilidad estática debido al cambio de la capacitancia  $\Delta C_c$  del cable se puede hallar según la expresión:

$$\frac{\text{Cambio en sensibilidad}}{\text{Sensibilidad inicial}} = -\frac{\Delta C_c}{C + \Delta C_c}$$

El amplificador operacional, debido a su alta ganancia y su alta impedancia de entrada se comporta como un elemento con un potencial de entrada prácticamente nulo y que sin embargo, no deja pasar la corriente.

La impedancia  $Z_2$  (s) resultante de la resistencia y la capacitancia de retroalimentación del preamplificador operacional es,

$$Z_2(s) = \frac{R_f}{1 + R_f C_f S_f}$$

Adicional a esto se tiene que la ganancia  $k$  del amplificador operacional es relativamente grande.

- *Modelo del Sensor para el control de la deformación basado en el método magnetostrictivo*

La magnetostricción se define como el cambio de dimensiones que experimentan los materiales ferromagnéticos al aplicarles un campo magnético. La máxima deformación magnetostrictiva que es el incremento de longitud en una dirección determinada normalizado a su longitud original, se encuentra alrededor de  $10^{-5}$  en

el caso de los materiales convencionales y supera el valor  $10^{-3}$  para ciertas aleaciones (materiales de magnetostricción gigante).

La magnetostricción puede ser positiva, cuando el material se expande al ser magnetizado, o negativa si se contrae. Para los materiales con magnetostricción positiva, la magnetización aumenta con la tensión mecánica, mientras que disminuye si la magnetostricción es negativa. El níquel es el paradigma de material de magnetostricción negativa. Siempre se contrae para valores crecientes del campo magnético. Por contra, el hierro presenta magnetostricción positiva, aunque sólo para campos moderados, ya que para campos altos ésta es negativa.

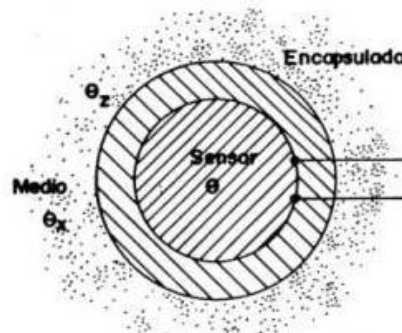
La deformación magnetostrictiva es una función par del campo, es decir, el signo de la deformación es independiente del signo del campo. Así, bajo la acción de un campo alterno moderado, un material de magnetostricción positiva siempre incrementará una de sus dimensiones cuando crezca el valor absoluto del campo instantáneo, y regresará a su posición inicial cuando éste disminuya. Debido a este carácter rectificador, la aplicación de un campo magnético alterno genera en un magnetostrictivo un movimiento de frecuencia doble respecto a la excitación.

➤ *Modelo del Sensor para el control de la temperatura y la humedad basado en el método termoresistivo*

La resistencia eléctrica de varios materiales cambia con la temperatura en una forma definida, pudiendo este fenómeno constituir el fundamento de un método para medir temperatura. Los materiales que se utilizan actualmente para medir resistencia eléctrica pueden agruparse en dos categorías principales: los conductores (metales) y los semiconductores. Los primeros fueron desarrollados antes y se denominan *termómetros de resistencia*. Los segundos se desarrollaron posteriormente y se denominan *termistores*. Cualquier técnica para medir resistencias (como el puente de Wheatstone) es compatible con estos elementos.

La característica dinámica de un sensor de temperatura está relacionada con la transferencia y acumulación de calor que determinan que el sensor incluya medios protectores, como el encapsulado de los termistores.

Figura 70. Sensor de temperatura



Las temperaturas  $\theta_x$ ;  $\theta_z$  y  $\theta$  son los cambios de las temperaturas del medio, la pared externa del encapsulado y la del sensor con respecto a la temperatura inicial de equilibrio.

$U_w$ ;  $U_s$  los cuales representan al coeficiente global de transferencia de calor entre el medio y el encapsulado y entre el encapsulado y el sensor ( $W/m^2 \cdot K$ )

$A_w$ ;  $A_s$  representando el área de transferencia de calor del encapsulado y del sensor ( $m^2$ )

$m_w$ ;  $m_s$  representando la masa del encapsulado y del sensor (Kg)

$C_w$ ;  $C_s$  haciendo referencia al calor específico a un volumen constante de la pared y el sensor ( $J/kg \cdot K$ )

El calor que ingresa al encapsulado es

$$q = A_w U_w (\theta_x - \theta_z)$$

El calor que sale del encapsulado es

$$q_1 = q - m_w C_w \theta_z$$

El calor que sale del encapsulado es igual al que entra al sensor, el cual se acumula en la masa del sensor, según la expresión,

$$q_1 = A_w U_w (\theta_x - \theta_z)$$

$$t_w = \frac{m_w C_w}{U_w A_w} \quad t_s = \frac{m_s C_s}{U_s A_s} \quad t_w = \frac{m_w C_w}{U_w A_w}$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones anteriores,  $t_{w(s)}$  es la constante de tiempo del sensor y  $\mathcal{Z}(s)$  un término de acoplamiento, debido a las impedancias de salida del encapsulado y de entrada del sensor

Se tiene entonces un sistema de segundo orden sobre amortiguamiento si  $\mathcal{Z}$  es pequeño comparado con  $(t_w + t_s)$

$$\frac{\theta(s)}{\theta_x(s)} = \frac{1}{(1 + \tau_s s) + (1 + \tau_w s)}$$

Finalmente

$$\frac{\theta(s)}{\theta_x(s)} = \frac{1}{1 + \tau_s s}$$

El modelo desarrollado es bastante flexible, aunque en algunos casos no es suficientemente exacto. Se puede lograr más exactitud, añadiendo más grados de libertad (incógnitas) al sistema, como por ejemplo, una temperatura  $\theta_y$  en la pared interna del encapsulado y por lo tanto, considerando la transferencia de calor por conducción a través del encapsulado. Para muchas aplicaciones o para estimar semi-cuantitativamente la influencia de algunos parámetros en la respuesta dinámica de un sensor de temperatura, las ecuaciones desarrolladas rinden resultados satisfactorios.

Mediante investigaciones y pruebas previamente realizadas, se lograron ciertos datos importantes a cerca del comportamiento de las vías o carreteras, las cuales se presentan a continuación.

Las condiciones optimas se pueden definir cuando se encuentran con una temperatura de 27°C a 38°C, con un flujo vehicular menor de 2500 ciclos y una deformación de 3 mm y se observa que el pavimento cumple con las normas de calidad exigidas por INVIAS y presenta un comportamiento adecuado.

Si el número de ciclos del tráfico vehicular se encuentra por encima de 2500, quiere decir que superó la etapa de la deformación elástica y por tanto se considera un desgaste normal ya que hay deformaciones menores a 1,5 cm.

Para condiciones de temperatura de 27°C a 38° C, un flujo vehicular que no supere los 2500 ciclos y una deformación de 20mm, se considera que el pavimento no cumple con las normas de calidad exigidas ya que la deformación

supera los 15 mm permisibles en la primera etapa de ciclos y por tanto es un pavimento inseguro.

Para condiciones de temperatura ambiente normales entre 27°C a 38°C, una deformación de 3 mm, un flujo vehicular menor a 2500 ciclos y una humedad superior a 45, se considera que el pavimento tiene una baja permeabilidad y su composición permite la adherencia del agua a su composición. Se considera que con el poco tiempo que posee no debería permitir ese nivel de humedad, por consiguiente el pavimento se considera inseguro.

Las siguientes características son proporcionadas por expertos en el tema y que ayudan a comprender y actuar de una manera más eficiente cuando se implementa “x” situación.

Cuando la variación de la humedad es del 80 %, de forma creciente, se considera que el pavimento necesita mantenimiento, comportándose de manera deficiente y por lo tanto el control difuso envía una alarma indicando que las condiciones en que se encuentra el sistema, puede llegar a un rápido desgaste del material.

Si el pavimento presenta una deformación por encima de 1.5 cm, este tiende a deformarse en grandes cantidades, tanto que lo más adecuado es realizar un mantenimiento oportuno para así “restablecer” el ciclo de vida del sistema.

Cuando el flujo vehicular se encuentra por encima de 15000 ciclos inicia una zona plástica, donde la deformación tendrá una pendiente mayor debido a que el pavimento ha cumplido en teoría su ciclo de vida útil, por lo tanto se envía una señal de mantenimiento o reparación.

De igual manera cuando la deformación supera los 4 cm, el pavimento no se va a encontrar en condiciones adecuadas, por lo tanto se envía una señal de deterioro, es decir, un cambio significativo en las capas que componen determinada vía.

Teniendo en cuenta los parámetros anteriores, se ha realizado una tabla que representa un resumen de las condiciones a las cuales puede estar sometida una vía y la señal o la acción que se realiza para que la central de control esté actualizada con respecto a las condiciones en las cuales se encuentra el sistema o la vía en este caso.

Tabla 11. Resumen de las condiciones a las cuales puede estar sometida una vía y la señal o la acción que se realiza para que la central de control esté actualizada con respecto a las condiciones en las cuales se encuentra el sistema

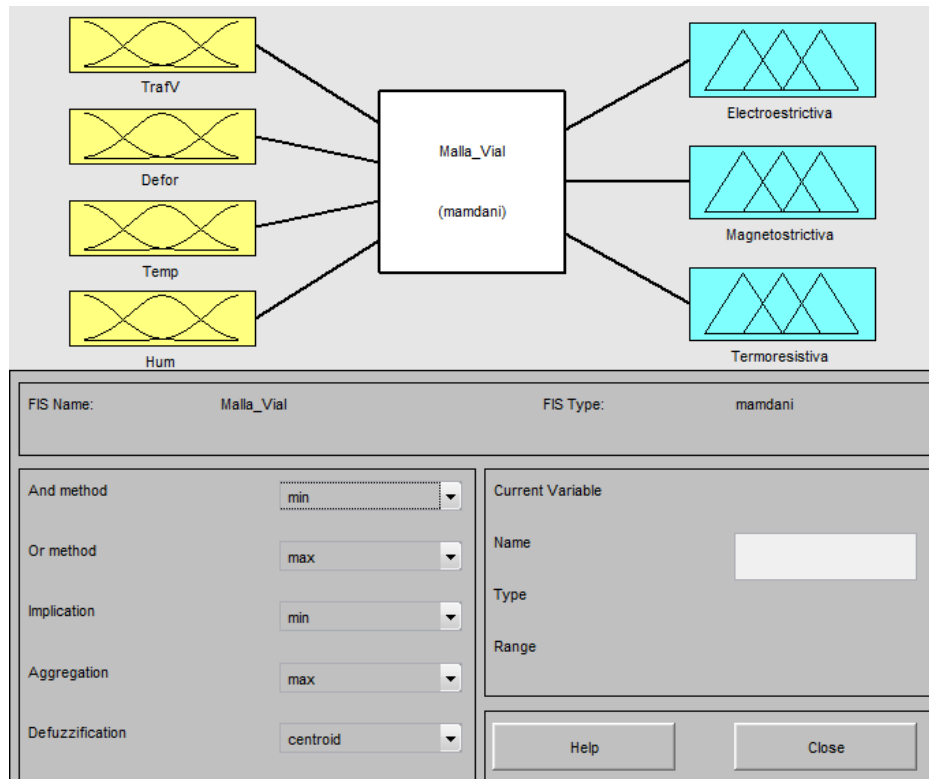
Interfaz gráfica	Controlador difuso	Significado
CONDICIONES ÓPTIMAS	Alerta Baja	El pavimento cumple con las normas exigidas por INVIAS.
DESGASTE NORMAL	Alerta Media Baja	Por la cantidad del flujo vehicular se considera que el pavimento permanece en un estado normal.
PAVIMENTO INSEGURO	Alerta Media	El pavimento no está en buenas condiciones y por tanto no cumple con las normas de INVIAS. Se determina así porque el flujo vehicular es muy bajo y el pavimento presenta humedad y deformaciones no permitidas para pavimentos recién colocados en la vía.
MANTENIMIENTO	Alerta Media Alta	El pavimento presenta deformaciones y humedad con un flujo vehicular medio o medio alto. Por tanto el pavimento necesita de mantenimiento
FALLA DEL PAVIMENTO	Alerta Alta	El pavimento falla debido a que ha superado un flujo vehicular mayor de 17000 y alteraciones en la humedad y deformación.

Con la culminación de la información necesaria con respecto al comportamiento del sistema, se ha determinado o realizado el siguiente sistema de control. Este realiza un chequeo de las condiciones en las cuales se encuentra la vía y teniendo en cuenta ésté, envía una señal o alarma a una central. Esta señal puede ser de alerta baja en donde el sistema se encuentra dentro de las condiciones normales, una alarma intermedia la cual indicará que existe un pequeño desgaste, condiciones inadecuadas, entre otros, que requerirá de un mantenimiento y finalmente una alta alarma, la cual indicará que la vía se encuentra en pésimas condiciones o un “desgaste total” de la vía y deberá ser reconstruida.

En el sistema Fuzzy, se tienen en cuenta cuales son las variables de entrada y cuales las variables de salida. Donde las variables de entrada representan los parámetros a medir o estudiar y las variables de salida, los métodos que sirven para analizar las condiciones en que se encuentra la vía, que a su vez representa el nivel de alarma que se enviará a la central.

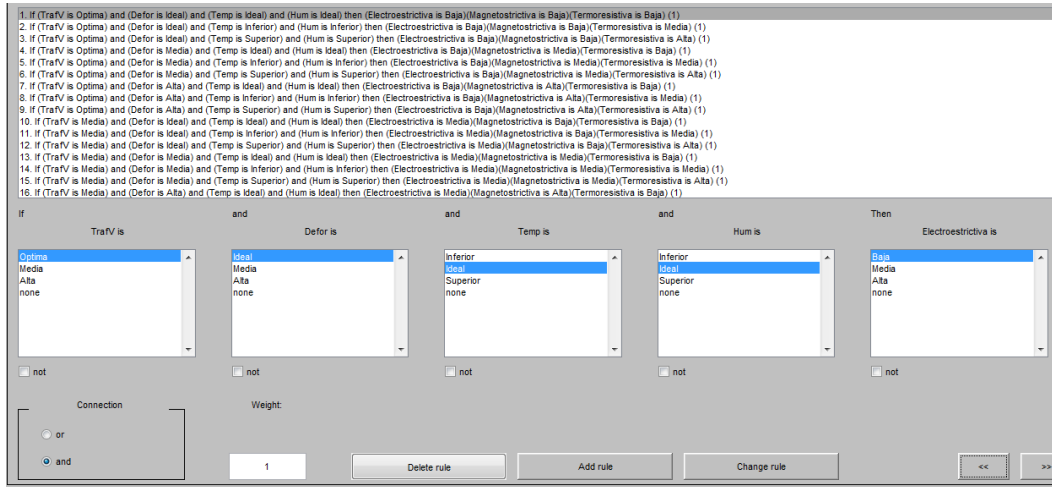


Figura 71. Sistema Fuzzy



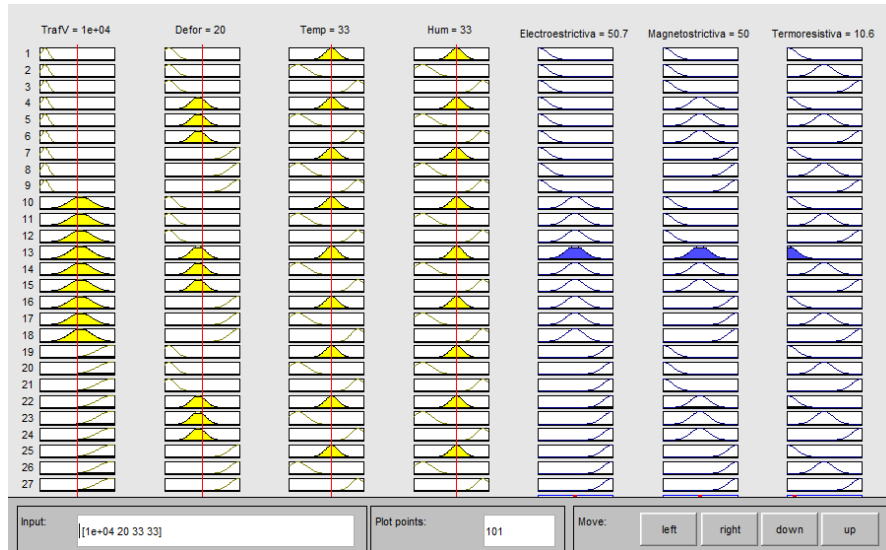
A continuación se plantean las reglas que permitan cumplir con el objetivo, que es enviar la señal adecuada a la central. Estas reglas son tenidas en cuenta mediante las condiciones que se encuentre la vía. Como por ejemplo, si el flujo vehicular, la humedad y la temperatura se encuentran en condiciones normales pero la deformación se ha visto alterada, se envía una señal por parte del sensor de deformación que indica un cambio está, pero los sensores de flujo vehicular, temperatura y humedad se van a mantener en las mismas condiciones.

Figura 72. Las reglas que permitan cumplir con el objetivo



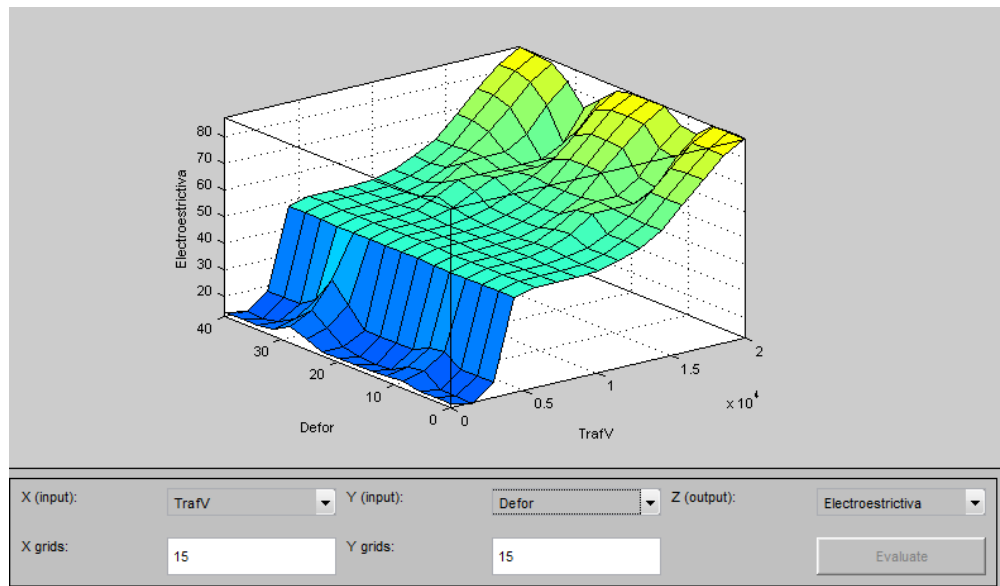
La siguiente grafica representa el rango de alarma enviada a la central, teniendo en cuenta las reglas plantadas previamente.

Figura 73. Comportamiento de los sensores cuando se encuentran en determinadas condiciones

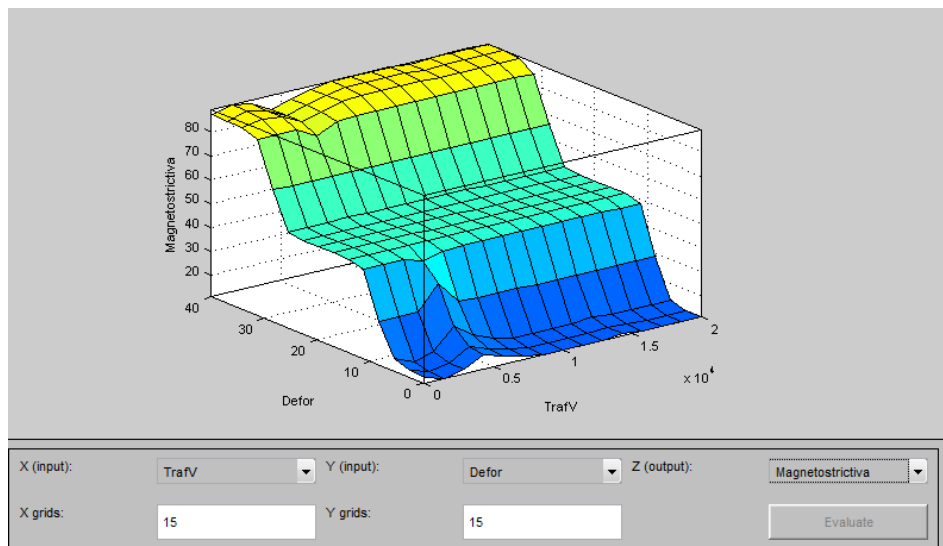


Las siguientes gráficas representan el comportamiento de los sensores cuando se encuentran en determinadas condiciones.

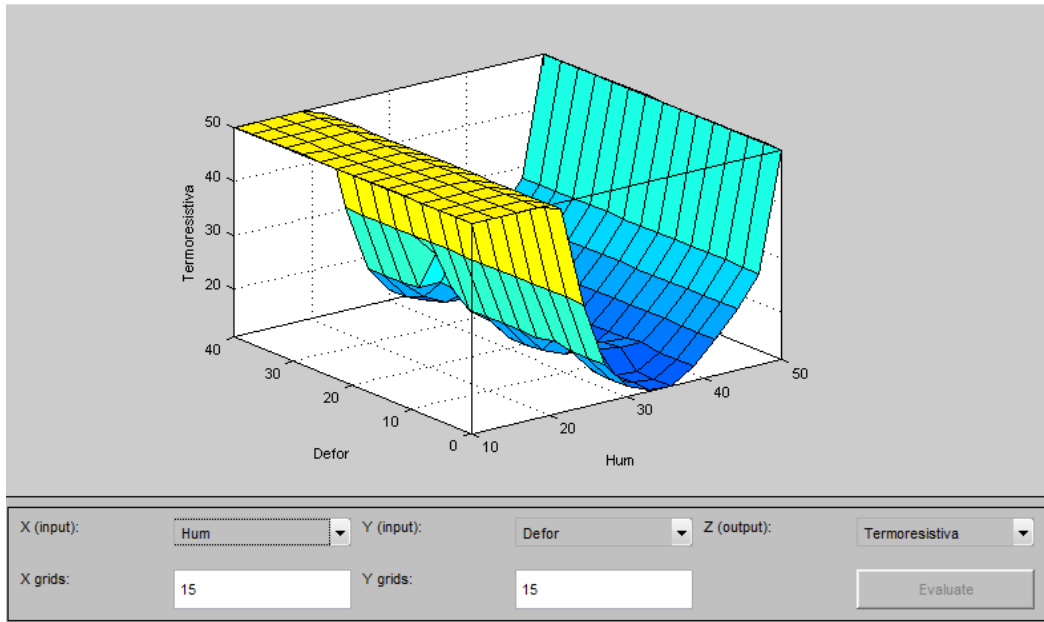
➤ *Comportamiento de la acción piezoeléctrica*



➤ *Comportamiento de la acción Magnetostrictiva*



➤ *Comportamiento de la acción Termoresistiva*



## CONCLUSIONES

Actualmente la mayoría de las inversiones están dirigidas a la comprensión de fenómenos a nanoescala, los procesos y creación de nuevos materiales; sin embargo es importante tener presente las tendencias tecnológicas, las cuales apuntan a los nanosistemas. La construcción de estos sistemas nanoescalares requerirá del uso de las de nanoescala, principios biológicos, tecnología de la información e integración de sistemas.

Existe interés por parte de diferentes sectores de la Industria en nanotecnología, porque impacta favorablemente en los costos de producción, respecto del uso de materiales o tecnologías tradicionales.

Al utilizar simuladores se reduce significativamente los costos.

Con el uso de técnicas de clonación artificial, basada en algoritmos evolutivos, es posible diseñar y construir sistemas inteligentes capaces de solucionar problemas con calidad superior a la lograda mediante otros métodos tradicionales, incluso de aquellos imposibles de resolver por métodos convencionales.

## BIBLIOGRAFÍA

Teik-Cheng Lim. (2011) Nanosensors Theory and Applications in Industry, Healthcare and Defense. Boca Raton: Taylor and Francis Group, LLC.

T. Pradeep. (2008) Nano: The Essentials Understanding Nanoscience and Nanotechnology. New York: McGraw-Hill.

Ahmed Busnaina. (2007) Nanomanufacturing Handbook. Boca Raton: Taylor and Francis Group, LLC.

Renzo Tomellini (2004) La nanotecnología. Innovaciones para el mundo del mañana. Luxemburgo: Comisión Europea

Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología, FECYT (2009) NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA Entre la ciencia ficción del presente y la tecnología del futuro. España: Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología.

[http://www.idepa.es/sites/web/idepaweb/Repositorios/galeria\\_descargas\\_idepa/AplicacionesIndustriales\\_Nanotecnologia.pdf](http://www.idepa.es/sites/web/idepaweb/Repositorios/galeria_descargas_idepa/AplicacionesIndustriales_Nanotecnologia.pdf)

<http://www.ijitee.org/attachments/File/v3i4/D1199093413.pdf>

<http://www.nano.gov/you/nanotechnology-benefits>

<http://blogs.creamoselfuturo.com/nano-tecnologia/>

<http://www.ehu.eus/sgi/software-de-calculo/siesta#informaciongeneral>

<http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/diccionario/nanomateriales.htm>

[http://catarina.udlap.mx/u\\_dl\\_a/tales/documentos/leip/vega\\_m\\_d/indice.html](http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/leip/vega_m_d/indice.html)

PABLO R. HERNÁNDEZ RODRÍGUEZ Bioelectrónica, Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV IPN, México.

Martinez, Pau & Marín, Pedro. “Diseño y estudio de una máquina de electrospinning”. Tomado de la red en Abril de 2017. Disponible en Internet: [https://upcommons.upc.edu/pfc/bitstream/2099.1/7123/4/03\\_Mem%C3%B2ria.pdf](https://upcommons.upc.edu/pfc/bitstream/2099.1/7123/4/03_Mem%C3%B2ria.pdf)

Jaimes Moreno, Edgar Mauricio. “Electroestimulador inteligente y sistema de clonación artificial de sensores de movimiento y control adaptativo-predictivo, por

acupuntura con agujas-electrodos y transmisión inalámbrica, evaluado en un diseño de prototipo construido”. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2009.

Siti Fatimah Abd Rahman, Nor Azah Yusof, Uda Hashim, M. Nuzaihan Md Nor. “Design and Fabrication of Silicon Nanowire based Sensor”. Institute of Advanced Technology, Universiti Putra Malaysia. 2013.

Rodriguez Pacheco, Jorge Humberto. “Prototipo automatizado para la implementacion de la técnica “electrospinning” en aplicaciones farmacológicas”. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2010.

Asgar, Z., Kodakara, S., & Lilja, D. (2005). Fault-tolerant image processing using stochastic logic (Tech. Rep.). Retrieved from <http://www.zasgar.net/zain/publications/publications.php>

Bryant, R., & Chen, Y. (1995). Verification of arithmetic circuits with binary moment diagrams. In Proceedings of the 32nd Design Automation Conference (DAC '95), San Francisco (pp.535-541).

DeHon, A. (2005). Nanowire-based programmable architectures. *ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems*, 1(2), 109–162. doi:10.1145/1084748.1084750

FENA. (2006). Mission statement. Retrieved from <http://www.fena.org>

Qian, W, Backes, J, Riedel, M. (2009). The synthesis of stochastic Circuits for Nanoscale Computation.

[ADAM 94] ADAMI, C., Learning and complexity in genetic auto-adaptive systems. California Institute of Technology, 1994.

[ADEL 95] ADELI, H., Machine Learning: Neural Networks, Genetic Algorithms, and Fuzzy Systems. John Wiley and Sons, Inc, 1995.

S. A. Pérez. 2002. “Diseño de Sistemas Digitales con VHDL”. Ed. Thomson. Neil H. E. Weste and Kamran Eshraghian. Principles of CMOS VLSI Design. Addison-Wesley, 2nd edition, 1994.

Xilinx Inc., 2100 Logic Drive, San Jose, CA 95124. The Programmable Gate ArrayData Book, 1991.

National Academy of Science. Panel on Scientific and Medical Aspects of Human Cloning. August 7, 2001

Vera, F. (2006). "Sistema Electrónico de clonación Artificial de un Sensor de Viscosidad Basado en Hardware Evolutivo." Universidad de Pamplona.

WINTER, D. A. Biomechanics and Motor Control of Human Movement. Warterloo: Warterloo Press, 1991.

Pedro Carlos Russi. Estudo De Um Modelo Dinâmico Para Avaliação Física Do Corpo Humano. Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista. Sao Paulo. Brasil

Sistema electrónico de clonacion artificial de un sensor de viscosidad basado en hardware evolutivo. Fredy Vera Perez trabajo de grado para optar por el título de ingeniero electrónico. Universidad de Pamplona. 2006

Muñoz Antonio F. Sensorica e instrumentación, Mecánica de Alta precisión. . Pueblo y educación. 1997

Maneiro Malavé Ninoska. Algoritmos genéticos aplicados al problema cuadrático de asignación de facilidades. Departamento de Investigación Operativa, Escuela de Ingeniería Industrial, Universidad de Carabobo, Valencia. Venezuela. Febrero 2002

Faustino, A, Muñoz, Mariela. (2010). "Algoritmos y Sistemas Genéticos Aplicados en sistema de control en Tiempo Real Obtenido por Clonación Artificial para Prótesis Mecatrónica de Piel Artificial con Nanopartículas.". Universidad Autónoma de Bucaramanga y Universidad del Cauca, Colombia.

Bene-ficios de la Nanotecnología: Presentación. Euro Residentes. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia\\_responsable/nanotecnologia\\_bene-cios.html](http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia_responsable/nanotecnologia_bene-cios.html)

Caro Bejarano, José (2012). Los riesgos mundiales en el 2012 según el foro económico mundial. ieee.es. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.ieee.es/Galerias/-chero/docs\\_informativos/2012/DIEEEI06-2012\\_ForoEconomicoMundial\\_RiesgosGlobales2012\\_MJCaro\\_v2.pdf](http://www.ieee.es/Galerias/-chero/docs_informativos/2012/DIEEEI06-2012_ForoEconomicoMundial_RiesgosGlobales2012_MJCaro_v2.pdf)

García Díaz, J. (2006). Normalización sobre Nanotecnologías. AENOR, p. 26-28. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.nanospain.org/-les/Working%20Groups/NanoSpain\\_WGIndustrial\\_Normalizacion.pdf](http://www.nanospain.org/-les/Working%20Groups/NanoSpain_WGIndustrial_Normalizacion.pdf)

José Luis Carrillo Aguado. Cómo es la Nanotecnología según la FDA. Perdiositasenlinea.org. Tomado de la red en Abril de 2015. URL:



<http://www.periodistasenlinea.org/modules.php?op=modload&name=News&le=article&sid=23516>

Marquez, J. (2008). Nanobioética, nanobiopolítica y nanotecnología. Revista Salud Uninorte. 24 (1), 140-157. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://rcienti-cas.uninorte.edu.co/index.php/salud/article/view/3824/2435>

Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación y Organización mundial de la salud. Reunión Conjunta FAO/OMS de Expertos acerca de la aplicación de la nanotecnología en los sectores alimentario y agropecuario: posibles consecuencias para la inocuidad de los alimentos. Informe. Consultado en <http://www.fao.org/docrep/015/i1434s/i1434s00.pdf>

Panorama y perspectivas de la nanotecnología. Revista Virtual Pro, Agosto 2009 (91), pp17-18. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://www.revistavirtualpro.com/revista/index.php?ed=2009-08-01&pag=17>

Riesgos de la Nanotecnología. Euro Residentes. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia\\_responsable/riesgos\\_nanotecnologia.htm](http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia_responsable/riesgos_nanotecnologia.htm)

Creus Sole, A. "Instrumentación Industrial". 7 ed., México: Alfaomega, 2005.

Delgado, A. Inteligencia Artificial y Minirobots. Ecoe Ediciones, 1998.

Ghosh, A. N. R. Pal, and S. K. Pal, "Self-organization for object extraction using a multilayer neural network and fuzziness measures," IEEE Transactions on Fuzzy Systems, vol. 1, pp. 54-58, 1993.

CARDENAS, J., Diseño Geométrico de Carreteras, Primera Edición, Ecoe Ediciones, 2011.

CARREÑO, Y., Investigación de Sistemas de Control Inteligente del Tráfico Vehicular y Desarrollo de Instrumentación de Alta Precisión de Parámetros Asociados al Monitoreo, Mando y Control Automáticos de Carreteras Urbanas. Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores "Virginia Gutiérrez de Pineda Colciencias, Colombia 2011.

MONTEJO, A., Ingeniería de Pavimentos. Fundamentos, Estudios Básicos y Diseño, Tercera Edición, Tomo 1, Universidad Católica de Colombia, 2010.

C. J. Lin, C. H. Chen, and C. T. Lin, "Efficient self-evolving evolutionary learning for neurofuzzy inference systems," IEEE Transactions on Fuzzy Systems, vol. 16, pp. 1476- 1490, 2008.

D. Goldberg. *Genetics Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Massachusetts: Addison-Wesley Reading, 1983.

D. Nauck, F. Klawonn, and R. Kruse, "Foundations of neuro-fuzzy systems," Chichester, U.K.: Wiley, 1997.

D. Valdez, "Automatización en el área de bodega en una empresa de correo y mensajería para lograr una mayor productividad". M.S. tesis, Universidad De San Carlos De Guatemala, Guatemala, 2005.

F. E. Cellier, *Continuous System Modeling*. New York, 1991.

F. Munoz, "Sistemas de control inteligentes de la planta de viscorreduccion basados en la clonacion artificial de un sensor de viscosidad y parámetros asociados",

G. A. Carpenter, S. Grossberg, N. Markuzon, J. H. Reynolds, and D. B. Rosen, "Fuzzy ARTMAP: A neural network architecture for incremental supervised learning of analog multidimensional maps," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 3, pp. 698-713, 1992

H. Boudouda, H. Seridi H. Akdag. "The Fuzzy Possibilistic C-Means Classifier", *Asian Journal of Information Technology*, Vol. 4, no 11, pp. 981-985, 2005.

H. Ishibuchi, M. Nii, and T. Murata, "Linguistic rule extraction from neural networks and genetic-algorithm-based rule selection," in *IEEE International Conference on Neural Networks - Conference Proceedings*, Houston, TX, USA, 1997, pp. 2390-2395.

H. R. Berenji and P. Khedkar, "Learning and tuning fuzzy logic controllers through reinforcements," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 3, pp. 724-740, 1992.

H. Takagi, N. Suzuki, T. Koda, and Y. Kojima, "Neural networks designed on approximate reasoning architecture and their applications," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 13, pp. 1161-1170, 2002.  
[http://www.unipamplona.edu.co/unipamplona/hermesoft/portallG/home\\_2/recursos/investigacion/contenidos/01102007/sistemas\\_control\\_inteligente.jsp](http://www.unipamplona.edu.co/unipamplona/hermesoft/portallG/home_2/recursos/investigacion/contenidos/01102007/sistemas_control_inteligente.jsp). [Consultado 20 Marzo 2013].

I. Lache, F. Muñoz, "Investigación de nuevos prototipos de sensores y sistema de control por clonación artificial, basados en técnicas de inteligencia artificial" [En línea]. Disponible: <http://ivanovichlache.googlepages.com/PaperPamILS.doc> [Consultado 3 Febrero 2013]

J. Castro, J. Padilla y E. Romero, "Metodología para realizar una automatización utilizando PLC," *Impulso, Revista De Electrónica, Eléctrica Y Sistemas*

Computacionales, Departamento de Eléctrica y Electrónica del Instituto Tecnológico de Sonora, vol. 1, nro. 1, pp. 18-21, 2005.

J. J. Buckley and Y. Hayashi, "Fuzzy neural networks: A survey," *Fuzzy Sets and Systems*, vol. 66, pp. 1-13, 1994.

J. J. Hopfield and D. W. Tank, "'Neural' computation of decisions in optimization problems," *Biological Cybernetics*, vol. 52, pp. 141-152, 1985.

J. J. Hopfield, "Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities," *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, vol. 79, pp. 2554-2558, 1982.

J. M. Keller and D. J. Hunt, "Incorporating fuzzy membership functions into the perceptron algorithm," *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. PAMI-7, pp. 693-699, 1985.

J. M. Keller and H. Tahani, "Implementation of conjunctive and disjunctive fuzzy logic rules with neural networks," *International Journal of Approximate Reasoning*, vol. 6, pp. 221-240, 1992.

J. M. Keller, R. Krishnapuram, and F. C.-H. Rhee, "Evidence aggregation networks for fuzzy logic inference," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 3, pp. 761-769, 1992.

J. Rissanen, "Modeling by shortest data description," *Automatica*, vol. 14, pp. 465-471, 1978.

J.-S. R. Jang, "ANFIS: adaptive-network-based fuzzy inference system," *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics*, vol. 23, pp. 665-685, 1993.

J.S.R. Jang, N. Gulley, Natick. *Fuzzy Logic Toolbox*. MS, Mathworks, 2000.

K. J. Aström and P. Eykhoff, "System identification-A survey," *Automatica*, vol. 7, pp. 123-162, 1971.

K. J. Hunt, D. Sbarbaro, R. Zbikowski, and P. J. Gawthrop, "Neural networks for control systems - A survey," *Automatica*, vol. 28, pp. 1083-1112, 1992.

K. S. Narendra and K. Parthasarathy, "Identification and control of dynamical systems using neural networks," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 1, pp. 4-27, 1990.

L. Ljung and Z.-D. Yuan, "Asymptotic Properties of Black-Box Identification of Transfer Functions," *IEEE Transactions on Automatic Control*, vol. AC-30, pp. 514-530, 1985.

- L. Ljung, "System Identification: Theory for the User.," New Jersey: Prentice-Hall, 1999.
- L.-X. Wang and J. M. Mendel, "Fuzzy basis functions, universal approximation, and orthogonal least-squares learning," IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 3, pp. 807-814, 1992.
- Muñoz Mariela, Muñoz F, (2010). Diseño De Un Sistema De Control Basado en Clonación Artificial, ISSN: 1692-7257 Revista Tecnologías Avanzada Universidad de Pamplona, Colombia.
- N. K. Kasabov and Q. Song, "DENFIS: Dynamic evolving neural-fuzzy inference system and its application for time-series prediction," IEEE Transactions on Fuzzy Systems, vol. 10, pp. 144-154, 2002.
- N. K. Sinha and B. Kuszta, Modeling and identification of dynamic systems: Springer,1983. Networks, vol. 3, pp. 752-760, 1992.
- P. Angelov P. Filev, "An approach to online identification of Takagi-Sugeno fuzzy models", IEEE Trans. on Systems, Man, and Cybernetics, Part B: Cybernetics, 34(1), pp. 484-498, 2004.
- P. Eykhoff, "System Identification," John Wiley, 1974.
- Q. Song and N. K. Kasabov, "NFI: A neuro-fuzzy inference method for transductive reasoning," IEEE Transactions on Fuzzy Systems, vol. 13, pp. 799-808, 2005.
- Q. Song and N. Kasabov, "TWNFI - a transductive neuro-fuzzy inference system with weighted data normalization for personalized modeling," Neural Networks, vol. 19, pp. 1591-1596, 2006.
- R. Babuska, Fuzzy Modeling for Control: Kluwer Academic Publishers, 1998.
- R. Haber and H. Unbehauen, "Structure identification of nonlinear dynamic systems - A survey on input/output approaches," Automatica, vol. 26, pp. 651-677, 1990.
- R. J. Oentaryo, M. Pasquier, and C. Quek, "GenSoFNN-Yager: A novel brain-inspired generic self-organizing neuro-fuzzy system realizing Yager inference," Expert Systems with Applications, vol. 35, pp. 1825-1840, 2008.
- R. Johansson, "System Modeling and Identification," in Information and System Sciences New Jersey: Prentice Hall, 1993.
- S. C. Lee and E. T. Lee, "Fuzzy neural networks," Mathematical Biosciences, vol. 23, pp. 151-177, 1975.

S. K. Pal and S. Mitra, "Multilayer perceptron, fuzzy sets, and classification," IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 3, pp. 683-697, 1992.

S. Mitra and S. K. Pal, "Fuzzy multi-layer perceptron, inferencing and rule generation," IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 6, pp. 51-63, 1995.

S. Mitra and Y. Hayashi, "Neuro-fuzzy rule generation: survey in soft computing framework," IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 11, pp. 748-768, 2000.

S. Mitra, "Fuzzy MLP based expert system for medical diagnosis," Fuzzy Sets and Systems, vol. 65, pp. 285-296, 1994.

S.J. Derby, "Design of Automatic Machinery", New York: Marcel Dekker, 2005.

T. Calonge, L. Alonso, and R. Ralha, "Transputer implementations of a multilayer perceptron used for speech-recognition task," Microcomputer Applications, vol. 16, pp.64-69, 1997.

T. Kohonen, "The self-organizing map," Proceedings of the IEEE, vol. 78, pp. 1464-1480, 1990.

T. Söderström and P. Stoica, "System Identification," New York: Prentice Hall, 1989.

U.K.: Wiley, 1997.

W. A. Farag, V. H. Quintana, and G. Lambert-Torres, "A genetic-based neuro-fuzzy approach for modeling and control of dynamical systems," IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 9, pp. 756-767, 1998

W. L. Tung and C. Quek, "eFSM - A novel online neural-fuzzy semantic memory model," IEEE Transactions on Neural Networks, vol. 21, pp. 136-157, 2010.

Y. Hayashi, J. J. Buckley, and E. Czogala, "Fuzzy neural network with fuzzy signals and weights," International Journal of Intelligent Systems, vol. 8, pp. 527-537, 1993

Automatización de las vías, carreteras e inteligencia de automoviles – Pöllita Fänii  
<http://pollitafannimecatronica.wordpress.com/2011/12/08/automatizacion-de-las-vias-carreteras-e-inteligencia-de-automoviles/>

Carreteras, Análisis de Tráfico – Vaisala

<http://es.vaisala.com/sp/roads/applications/trafficanalysis/Pages/default.aspx>

La DGT trabaja en un proyecto para instaurar en España sistemas inteligentes de comunicación entre el vehículo y la vía – Lukor

<http://www.lukor.com/ordenadores/11012301.htm>

Sistemas inteligentes de transporte ¿Realidad o Ficción? – Circula Seguro  
<http://www.circulaseguro.com/vehiculos-y-tecnologia/sistemas-inteligentes-de-transporte-ficcion-o-realidad>

Sistemas inteligentes de transporte  
<http://www.google.com.co/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=8&ved=0CFEQFjAH&url=http%3A%2F%2Fwww.ii.es%2Fattachment%2F115765%2F&ei=yS5GUfTzLlrW0gGF3YDIBw&usg=AFQjCNF2RLjXUUjDjor9B-xqi5tlblePbw&bvm=bv.43828540,d.eWU&cad=rja>

CICNetwork – Ciencia y Tecnología  
<http://www.cicnetwork.es/upload/pdf/revistas/CN1.pdf>

BARROSO OLIVEIA, Luis Manuel. Automatização e controlo de um sistema de electrospinning [en línea]. Universidade do Minho, Escola de Engenharia. Octubre de 2011. Disponible en Internet: [https://repositorium.sdum.uminho.pt/bitstream/1822/16498/1/pg16155\\_TESE\\_ME M.pdf](https://repositorium.sdum.uminho.pt/bitstream/1822/16498/1/pg16155_TESE_ME M.pdf)

DUQUE SÁNCHEZ, Lina Marcela; RODRÍGUEZ, Leonardo y LÓPEZ, Marcos. Electrospinning: La Era de las Nanofibras [en línea]. En: Revista Iberoamericana de Polímeros Volumen 14(1), Enero de 2013.

Siti Fatimah Abd Rahman, Nor Azah Yusof, Uda Hashim, M. Nuzaihan Md Nor. "Design and Fabrication of Silicon Nanowire based Sensor". Institute of Advanced Technology, Universiti Putra Malaysia. 2013.

Qian, W, Backes, J, Riedel, M. (2009). The synthesis of stochastic Circuits for Nanoscale Computation.

Rodríguez Pacheco, Jorge Humberto. "Prototipo automatizado para la implementación de la técnica "electrospinning" en aplicaciones farmacológicas". Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2010.

MANTILLA, Oscar Alberto. Diseño y Construcción de un Prototipo Electro-mecánico para la Implementación de la Técnica " Electrospinning " en Aplicaciones Farmacológicas. Junio de 2006.

Bryant, R., & Chen, Y. (1995). Verification of arithmetic circuits with binary moment diagrams. In Proceedings of the 32nd Design Automation Conference (DAC '95), San Francisco (pp.535-541).

DeHon, A. (2005). Nanowire-based programmable architectures. *ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems*, 1(2), 109–162. doi:10.1145/1084748.1084750

Jie Chen y Hua Li, “Design Methodology for Hardware-efficient Fault-tolerant Nanoscale Circuits”, en *IEEE International Symposium on Circuits and Systems’ 2006*

USERO, Rafael y SUÁREZ, Natalia. Electrospinning de poliesteramidas Biodegradables [en línea]. 2010. [Citado 3 feb 2016] Disponible en Internet: <URL: [https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2099.1/8422/01\\_Resum.pdf?sequence=2&isAllowed=y](https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2099.1/8422/01_Resum.pdf?sequence=2&isAllowed=y)>

MUÑOZ, A.F., Aplicación de los algoritmos genéticos en la identificación y control de bioprocesos por clonación artificial. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetic V 19 No. 2* 58-76, 1998

MUÑOZ, A.F., Tecnología de clonación artificial on-line de sensores y controladores. Oficina Internacional de Invenciones, Patentes y Marcas, República de Cuba. Registros No. 7-789735, 2000

ADAMI, C., Learning and complexity in genetic auto-adaptive systems. California Institute of Technology, 1994.

ADELI, H., Machine Learning: Neural Networks, Genetic Algorithms, and Fuzzy Systems. John Wiley and Sons, Inc, 1995.

S. A. Pérez. 2002. “Diseño de Sistemas Digitales con VHDL”. Ed. Thomson. Neil H. E. Weste and Kamran Eshraghian. Principles of CMOS VLSI Design. Addison-Wesley, 2nd edition, 1994.

Xilinx Inc., 2100 Logic Drive, San Jose, CA 95124. The Programmable Gate ArrayData Book, 1991.

National Academy of Science. Panel on Scientific and Medical Aspects of Human Cloning. August 7, 2001

Vera, F.. “Sistema Electrónico de clonación Artificial de un Sensor de Viscosidad Basado en Hardware Evolutivo.” Universidad de Pamplona. 2006

WINTER, D. A. Biomechanics and Motor Control of Human Movement. Warterloo: Warterloo Press, 1991.

Pedro Carlos Russi. Estudo De Um Modelo Dinâmico Para Avaliação Física Do Corpo Humano. Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista. Sao Paulo. Brasil

Sistema electrónico de clonación artificial de un sensor de viscosidad basado en hardware evolutivo. Fredy Vera Perez trabajo de grado para optar por el título de ingeniero electrónico. Universidad de Pamplona. 2006

Muñoz Antonio F. Sensorica e instrumentación, Mecánica de Alta precisión. . Pueblo y educación. 1997

Maneiro Malavé Ninoska. Algoritmos genéticos aplicados al problema cuadrático de asignación de facilidades. Departamento de Investigación Operativa, Escuela de Ingeniería Industrial, Universidad de Carabobo, Valencia. Venezuela. Febrero 2002

Faustino, A, Muñoz, Mariela. (2010). "Algoritmos y Sistemas Genéticos Aplicados en sistema de control en Tiempo Real Obtenido por Clonación Artificial para Prótesis Mecatrónica de Piel Artificial con Nanopartículas.". Universidad Autónoma de Bucaramanga y Universidad del Cauca, Colombia.

Beneficios de la Nanotecnología: Presentación. Euro Residentes. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia\\_responsable/nanotecnologia\\_beneficios.htm](http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia_responsable/nanotecnologia_beneficios.htm)

Caro Bejarano, José (2012). Los riesgos mundiales en el 2012 según el foro económico mundial. ieee.es. Tomado de la red en abril de 2015. URL: [http://www.ieee.es/Galerias/-chero/docs\\_informativos/2012/DIEEEI06-2012\\_ForoEconomicoMundial\\_RiesgosGlobales2012\\_MJCaro\\_v2.pdf](http://www.ieee.es/Galerias/-chero/docs_informativos/2012/DIEEEI06-2012_ForoEconomicoMundial_RiesgosGlobales2012_MJCaro_v2.pdf)

García Díaz, J. (2006). Normalización sobre Nanotecnologías. AENOR, p. 26-28. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.nanospain.org/-les/Working%20Groups/NanoSpain\\_WGIndustrial\\_Normalizacion.pdf](http://www.nanospain.org/-les/Working%20Groups/NanoSpain_WGIndustrial_Normalizacion.pdf)

José Luis Carrillo Aguado. Cómo es la Nanotecnología según la FDA. Perdiositasenlinea.org. Tomado de la red en abril de 2015. URL: <http://www.periodistasenlinea.org/modules.php?op=modload&name=News&le=article&sid=23516>

Marquez, J. (2008). Nanobioética, nanobiopolítica y nanotecnología. Revista Salud Uninorte. 24 (1), 140-157. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://rcientificas.uninorte.edu.co/index.php/salud/article/view/3824/2435>

Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación y Organización mundial de la salud. Reunión Conjunta FAO/OMS de Expertos acerca de la aplicación de la nanotecnología en los sectores alimentario y agropecuario: posibles consecuencias para la inocuidad de los alimentos. Informe. Consultado en <http://www.fao.org/docrep/015/i1434s/i1434s00.pdf>



Panorama y perspectivas de la nanotecnología. Revista Virtual Pro, Agosto 2009 (91), pp17-18. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://www.revistavirtualpro.com/revista/index.php?ed=2009-08-01&pag=17>

Riesgos de la Nanotecnología. Euro Residentes. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia\\_responsable/riesgos\\_nanotecnologia.htm](http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia_responsable/riesgos_nanotecnologia.htm)

Ingeniería en Nanotecnología. Upb. Tomado de la red en Mayo 17 de 2015. URL: [http://www.upb.edu.co/portal/page?\\_pageid=1054,53529575&\\_dad=portal&\\_schema=PORTAL](http://www.upb.edu.co/portal/page?_pageid=1054,53529575&_dad=portal&_schema=PORTAL)

GALVIS, Dalya Julieth. Sistema de electroestimulación por tecnología de fabricación de electrohilado. Noviembre de 2014

GAMBOA, Wilsón., MANTILLA, O., CASTILLO, V., Producción de micro y nano fibras a partir de la técnica "Electrospinning" para aplicaciones farmacológicas. Agosto, 2007, vol. 053, 1-4

J. Chen, J. Mundy, Y. Bai, S. Chan, P. Petrica, y R. I. Bahar, "A probabilistic approach to nano-computing," En Proceedings of the Second Workshop on Non-Silicon Computing, San Diego, CA, Junio 2003.

K. N. Patel, I. L. Markov, y J. P. Hayes, "Evaluating circuit reliability under probabilistic gate-level fault models," en IEEE International Workshop on Logic and Synthesis, 2003.

MODELAJE Y SIMULACION MULTIFISICA DE UN SENSOR DE GAS DE  $\text{SnO}_2$  EN COVENTORWARE™. Andrés Felipe Méndez Jiménez, Alba Ávila Bernal. Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica, Universidad de los Andes. Bogota, Colombia. Noviembre de 2005

MEMORIAS I SEMINARIO INTERNACIONAL DE NANOTECNOLOGÍA UDES 2011.

HERSEL U., DAHMEN C., KESSLER H. RGD modified polymers: biomaterials for stimulated cell adhesion and beyond. Biomaterials. Vol. 24, 2003, p. 4385-4415.

DOSHI, Jayesh., RENEKER, Darrell H. Electrospinning process and applications of electrospun fibers: Journal of Electrostatic. Agosto, 1995, vol. 35. 151-160.

J.S.R Jang y Sun C.T(1993) Funcional Equivalence Between Radial Basis Funtion Networks and Fuzzy Inference Systems. IEEE Transactions on Neuronal Networks.

K.F. Man and K.S. Tang Genetic Algorithms for Control and Signal Processing Department of Electronic Engineering City University of Hong Kong

Haber and H. Unbehauen, "Structure identification of nonlinear dynamic systems – A survey on input/output approaches," Automatica, vol. 26, pp. 651-677, 1990.

Delgado Alberto Rule Based System with DNA Chip Proceedings of the 2003 IEEE International Symposium on Intelligent Control Houston, Texas October 5-8, 2003

D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulations software SIESTA: from algorithms to applications, Academic Press (1996).

Huifei Rao, Jie Chen, Changhong Yu, Woon Tiong and others Ensemble Dependent Matrix Methodology for Probabilistic-Based Fault-tolerant Nanoscale Circuit Design

Muñoz Antonio F NUEVOS MÉTODOS Y PROCEDIMIENTOS DE ALTA PRECISIÓN APLICADO A PAVIMENTOS Y VÍA CERTIFICADO DE REGISTRO DE SOPORTE LÓGICO – SOFTWARE TÉCNICAS DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL BASADOS EN ALGORITMOS GEN ÉTICOS PARA DETERMINAR EL DESEMPEÑO A PARTIR DE LOS PARÁMETROS DE COMPORTAMIENTO Libro - Tomo – Partida 13-40-467 Fecha Registro 03-Feb-2014

Durakbasa et PUC Río Brasil CERTIFICADO DE DERECHO DE AUTOR Registro 0410263/CA Fuzzy Logic Measurement Nanosystems desig

Entrenamientos. “Fitness y electroestimulación”. Tomado de la red en Agosto de 2014. URL: <http://www.entrenamientos.org/entrenamiento-fisico/item/70-fitness-y-electroestimulacion>

Entrenamientos. “Entrenamiento físico y electroestimulación”. Tomado de la red en Agosto de 2014. URL: <http://www.entrenamientos.org/entrenamiento-fisico/item/47-electroestimulacion>

Martinez, Pau & Marín, Pedro. “Diseño y estudio de una máquina de electrospinning”. Tomado de la red en Agosto Septiembre de 2014. URL: [https://upcommons.upc.edu/pfc/bitstream/2099.1/7123/4/03\\_Mem%C3%B2ria.pdf](https://upcommons.upc.edu/pfc/bitstream/2099.1/7123/4/03_Mem%C3%B2ria.pdf)

Jaimes Moreno, Edgar Mauricio. “Electroestimulador inteligente y sistema de clonación artificial de sensores de movimiento y control adaptativo-predictivo, por acupuntura con agujas-electrodos y transmisión inalámbrica, evaluado en un diseño de prototipo construido”. Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2009.

Siti Fatimah Abd Rahman, Nor Azah Yusof, Uda Hashim, M. Nuzaihan Md Nor. "Design and Fabrication of Silicon Nanowire based Sensor". Institute of Advanced Technology, Universiti Putra Malaysia. 2013.

Rodriguez Pacheco, Jorge Humberto. "Prototipo automatizado para la implementacion de la técnica "electrospinning" en aplicaciones farmacológicas". Universidad Autónoma de Bucaramanga. 2010.

Asgar, Z., Kodakara, S., & Lilja, D. (2005). Fault-tolerant image processing using stochastic logic (Tech. Rep.). Retrieved from <http://www.zasgar.net/zain/publications/publications.php>

Bryant, R., & Chen, Y. (1995). Verification of arithmetic circuits with binary moment diagrams. In Proceedings of the 32nd Design Automation Conference (DAC '95), San Francisco (pp.535-541).

DeHon, A. (2005). Nanowire-based programmable architectures. ACM Journal on Emerging Technologies in Computing Systems, 1(2), 109–162. doi:10.1145/1084748.1084750

FENA. (2006). Mission statement. Retrieved from <http://www.fena.org>

Qian, W, Backes, J, Riedel, M. (2009). The synthesis of stochastic Circuits for Nanoscale Computation.

MUÑOZ, A.F., Aplicación de los algoritmos genéticos en la identificación y control de bioprocesos por clonación artificial. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetic V 19 No. 2 58-76, 1998

MUÑOZ, A.F., Tecnología de clonación artificial on-line de sensores y controladores. Oficina Internacional de Invenciones, Patentes y Marcas, República de Cuba. Registros No. 7-789735, 2000

MUÑOZ, A.F., Equipo de control genético de la composición en medios continuos on-line. Oficina Internacional de Invenciones, Patentes y Marcas, República de Cuba. Registros No. 7-789734, 2001.

ADAMI, C., Learning and complexity in genetic auto-adaptive systems. California Institute of Technology, 1994

ADELI, H., Machine Learning: Neural Networks, Genetic Algorithms, and Fuzzy Systems. John Wiley and Sons, Inc, 1995.

S. A. Pérez. 2002. "Diseño de Sistemas Digitales con VHDL". Ed. Thomson. Neil H. E. Weste and Kamran Eshraghian. Principles of CMOS VLSI Design. Addison-Wesley, 2nd edition, 1994.

Xilinx Inc., 2100 Logic Drive, San Jose, CA 95124. The Programmable Gate ArrayData Book, 1991.

National Academy of Science. Panel on Scientific and Medical Aspects of Human Cloning. August 7, 2001

Vera, F. (2006). "Sistema Electrónico de clonación Artificial de un Sensor de Viscosidad Basado en Hardware Evolutivo." Universidad de Pamplona.

WINTER, D. A. Biomechanics and Motor Control of Human Movement. Warterloo: Warterloo Press, 1991.

Pedro Carlos Russi. Estudo De Um Modelo Dinâmico Para Avaliação Física Do Corpo Humano. Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá da Universidade Estadual Paulista. Sao Paulo. Brasil

Sistema electrónico de clonacion artificial de un sensor de viscosidad basado en hardware evolutivo. Fredy Vera Perez trabajo de grado para optar por el título de ingeniero electrónico. Universidad de Pamplona. 2006

Muñoz Antonio F. Sensorica e instrumentación, Mecánica de Alta precisión. . Pueblo y educación. 1997

Maneiro Malavé Ninoska. Algoritmos genéticos aplicados al problema cuadrático de asignación de facilidades. Departamento de Investigación Operativa, Escuela de Ingeniería Industrial, Universidad de Carabobo, Valencia. Venezuela. Febrero 2002

Faustino, A, Muñoz, Mariela. (2010). "Algoritmos y Sistemas Genéticos Aplicados en sistema de control en Tiempo Real Obtenido por Clonación Artificial para Prótesis Mecatrónica de Piel Artificial con Nanopartículas.". Universidad Autónoma de Bucaramanga y Universidad del Cauca, Colombia.

Bene-ficios de la Nanotecnología: Presentación. Euro Residentes. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia\\_responsable/nanotecnologia\\_bene-cios.htm](http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia_responsable/nanotecnologia_bene-cios.htm)

Caro Bejarano, José (2012). Los riesgos mundiales en el 2012 según el foro económico mundial. ieee.es. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.ieee.es/Galerias/-chero/docs\\_informativos/2012/DIEEEI06-2012\\_ForoEconomicoMundial\\_RiesgosGlobales2012\\_MJCaro\\_v2.pdf](http://www.ieee.es/Galerias/-chero/docs_informativos/2012/DIEEEI06-2012_ForoEconomicoMundial_RiesgosGlobales2012_MJCaro_v2.pdf)

García Díaz, J. (2006). Normalización sobre Nanotecnologías. AENOR, p. 26-28. Tomado de la red en Abril de 2015. URL:

[http://www.nanospain.org/-les/Working%20Groups/NanoSpain\\_WGIndustrial\\_Normalizacion.pdf](http://www.nanospain.org/-les/Working%20Groups/NanoSpain_WGIndustrial_Normalizacion.pdf)

José Luis Carrillo Aguado. Cómo es la Nanotecnología según la FDA. Perdiositasenlinea.org. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://www.periodistasenlinea.org/modules.php?op=modload&name=News&le=article&sid=23516>

Marquez, J. (2008). Nanobioética, nanobiopolítica y nanotecnología. Revista Salud Uninorte. 24 (1), 140-157. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://rcienti-cas.uninorte.edu.co/index.php/salud/article/view/3824/2435>

Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación y Organización mundial de la salud. Reunión Conjunta FAO/OMS de Expertos acerca de la aplicación de la nanotecnología en los sectores alimentario y agropecuario: posibles consecuencias para la inocuidad de los alimentos. Informe. Consultado en <http://www.fao.org/docrep/015/i1434s/i1434s00.pdf>

Panorama y perspectivas de la nanotecnología. Revista Virtual Pro, Agosto 2009 (91), pp17-18. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: <http://www.revistavirtualpro.com/revista/index.php?ed=2009-08-01&pag=17>

Riesgos de la Nanotecnología. Euro Residentes. Tomado de la red en Abril de 2015. URL: [http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia\\_responsable/riesgos\\_nanotecnologia.htm](http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/nanotecnologia_responsable/riesgos_nanotecnologia.htm)

D. Olea, S.S. Alexandre, P. Amo-Ochoa, A. Guijarro, F. de Jesús, J.M. Soler, P.J. de Pablo, F. Zamora, J. Gómez Herrero, *Advanced Materials* 2005, 17, 1761-1765.

“Assembling of Dimeric Entities of Cd(II) with 6-Mercaptopurine to Afford One dimensional Coordination Polymers: Synthesis and Scanning Probe Microscopy Characterization”.

P. Amo-Ochoa, M.I. Rodríguez-Tapiador, O. Castillo, D. Olea, A. Guijarro, S.S. Alexandre, J. Gómez-Herrero, F. Zamora, *Inorganic Chemistry* 2006, 45, 7642-7650.

“Electrical Conductivity in Platinum-Dimer Columns”.

A. Guijarro, O. Castillo, A. Calzolari, P. J. Sanz Miguel, C. J. Gómez-García, R. di Felice, F. Zamora, *Inorganic Chemistry* 2008, 47, 9736-9738.

“Organization of Coordination Polymers on Surfaces by Direct Sublimation”.

L. Welte, U. García-Couceiro, O. Castillo, D. Olea, C. Polop, A. Guijarro, A. Luque, J.

M. Gómez-Rodríguez, J. Gómez Herrero, F. Zamora, *Advanced Materials* 2009, 21, 2025-2028.

“Nanofibers generated by spontaneous self-assembly on surfaces of individual bimetallic building blocks”.

R. Mas-Ballesté, R. Gonzalez-Prieto, A. Guijarro, M. A. Fernández, F. Zamora, *Dalton Transactions* 2009, Submitted.

“MMX as conductors from single crystals to nanostructures”. A. Guijarro, O. Castillo, L. Welte, A. Calzolari, P. J. Sanz Miguel, C. J. Gómez-García, D. Olea, R. di Felice, J. Gómez-Herrero, F. Zamora, *Journal of the American Chemical Society* 2009, Submitted.

Ozin, G.; Arsenault, A. C. “Nanotechnology, A Chemical Approach to Nanomaterials” RSC Publishing, 2005

página web <http://www.intel.com>, marzo 2009. 3 (a) Gates, B. D. *Chem. Rev.* 2005, 105, 1171-1196 (b) Barth, J. V. *Nature* 2005, 437,671-679.

### **Bibliografía Software Molecular workbench**

Charles Xie. SPORE, Science Prize for Online Resources in Education; <http://www.sciencemaq.org/site/special/spore/>

Pryor. R. W. *Multiphysics Modeling Using COMSOL: A First Principles Approach* (Jones and Bartlett Publishers, Sudbury, MA, 2009).

Bridson, C. R. *Batty, Science* 330, 1756 (2010).  
[Abstract/FREE Full Text](#)

Finkelstein N. D. et al., *Phys. Rev. Spec. Top. Phys. Educ. Res.* 1, 010103 (2005).  
[CrossRef](#)

Klahr, L. M. Triona, C. Williams, *J. Res. Sci. Teach.* 44, 183 (2007).  
[CrossRefWeb of Science](#)

Leach A. R., *Molecular Modeling: Principles and Applications* (Pearson Education, Upper Saddle River, NJ, ed.2, 2001).  
D. C. Rappaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997).

N. Watanabe, M. Tsukada, Phys. Rev. E Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat. Interdiscip. Topics 62, (2 Pt B), 2914 (2000).

[CrossRefPubMed](#)

R. Feynman, J. Microelectromech. Syst. 1, 60 (1992).

[CrossRef](#)

W. H. Schmidt, C. C. McKnight, S. A. Raizen  
, A Splintered Vision: An Investigation of U.S. Science and Mathematics  
Education (Kluwer Academic Press, Boston, MA, 1997).

National Research Council, Conceptual Framework for New Science Education  
Standards,

update 7, March 2011; [http://www7.nationalacademies.org/bose/Standards\\_Framework\\_Homepage.html](http://www7.nationalacademies.org/bose/Standards_Framework_Homepage.html).

Y. B. Kafai, Games Cult. 1, 36 (2006).

#### Bibliografía Software VMD

William Humphrey, Andrew Dalke, and Klaus Schulten.  
VMD - Visual Molecular Dynamics.  
J. Mol. Graphics, 14:33-38, 1996.

R. Sharma, T. S. Huang, V. I. Pavlovic, K. Schulten, A. Dalke, J. Phillips, M. Zeller,  
W. Humphrey, Y. Zhao, Z. Lo, and S. Chu.  
Speech/gesture interface to a visual computing environment for molecular  
biologists.  
In Proceedings of 13th ICPR 96, volume 3, pages 964-968, 1996.

Rajeev Sharma, Michael Zeller, Vladimir I. Pavlovic, Thomas S. Huang, Zion Lo,  
Stephen Chu, Yunxin Zhao, James C. Phillips, and Klaus Schulten.  
Speech/gesture interface to a visual-computing environment.  
IEEE Comp. Graph. App., 20:29-37, 2000.

Simon Cross, Michelle M. Kuttell, John E. Stone, and James E. Gain. Visualization of cyclic and multi-branched molecules with VMD. *J. Mol. Graph. Model.*, 28:131-139, 2009.

John E. Stone, Axel Kohlmeyer, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. Immersive molecular visualization and interactive modeling with commodity hardware. *Lect. Notes in Comp. Sci.*, 6454:382-393, 2010.

John E. Stone, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. Immersive out-of-core visualization of large-size and long-timescale molecular dynamics trajectories. *Lect. Notes in Comp. Sci.*, 6939:1-12, 2011.

John E. Stone, William R. Sherman, and Klaus Schulten. Immersive molecular visualization with omnidirectional stereoscopic ray tracing and remote rendering. 2016 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW), pages 1048-1057, 2016.

Michael Zeller, James C. Phillips, Andrew Dalke, William Humphrey, Klaus Schulten, Rajeev Sharma, T. S. Huang, V. I. Pavlovic, Y. Zhao, Z. Lo, and S. Chu. A visual computing environment for very large scale biomolecular modeling. In *Proceedings of the 1997 IEEE International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP)*, pages 3-12. IEEE Computer Society Press, 1997.

John E. Stone, Justin Gullingsrud, Paul Grayson, and Klaus Schulten. A system for interactive molecular dynamics simulation. In John F. Hughes and Carlo H. Séquin, editors, 2001 ACM Symposium on Interactive 3D Graphics, pages 191-194, New York, 2001. ACM SIGGRAPH.

Matthieu Chavent, Tyler Reddy, Joseph Goose, Anna Caroline E. Dahl, John E. Stone, Bruno Jobard, and Mark S.P. Sansom. Methodologies for the analysis of instantaneous lipid diffusion in MD simulations of



large membrane systems.  
Faraday Discuss., 169:455-475, 2014.

Benjamin G. Levine, John E. Stone, and Axel Kohlmeyer.  
Fast analysis of molecular dynamics trajectories with graphics processing units-  
radial distribution function histogramming.  
J. Comp. Phys., 230:3556-3569, 2011.

John Stone and Mark Underwood.  
Rendering of numerical flow simulations using MPI.  
In Second MPI Developer's Conference, pages 138-141. IEEE Computer Society  
Technical Committee on Distributed Processing, IEEE Computer Society Press,  
1996.

John E. Stone.  
An Efficient Library for Parallel Ray Tracing and Animation.  
Master's thesis, Computer Science Department, University of Missouri-Rolla, April  
1998.

John E. Stone, Barry Isralewitz, and Klaus Schulten.  
Early experiences scaling VMD molecular visualization and analysis jobs on Blue  
Waters.  
In Extreme Scaling Workshop (XSW), 2013, pages 43-50, Aug. 2013.

I. Wald, G. Johnson, J. Amstutz, C. Brownlee, A. Knoll, J. Jeffers, J. Gunther, and  
P. Navratil.  
OSPRay - a CPU ray tracing framework for scientific visualization.  
IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 23(1):1-1, 2017.

John E. Stone, James C. Phillips, Peter L. Freddolino, David J. Hardy, Leonardo G.  
Trabuco, and Klaus Schulten.  
Accelerating molecular modeling applications with graphics processors.  
J. Comp. Chem., 28:2618-2640, 2007.

John D. Owens, Mike Houston, David Luebke, Simon Green, John E. Stone, and James C. Phillips.  
GPU computing.  
Proc. IEEE, 96:879-899, 2008.

Christopher I. Rodrigues, David J. Hardy, John E. Stone, Klaus Schulten, and Wen-mei W. Hwu.  
GPU acceleration of cutoff pair potentials for molecular modeling applications.  
In CF'08: Proceedings of the 2008 conference on Computing Frontiers, pages 273-282, New York, NY, USA, 2008. ACM.

David J. Hardy, John E. Stone, and Klaus Schulten.  
Multilevel summation of electrostatic potentials using graphics processing units.  
J. Paral. Comp., 35:164-177, 2009.

Volodymyr Kindratenko, Jeremy Enos, Guochun Shi, Michael Showerman, Galen Arnold, John E. Stone, James Phillips, and Wen-mei Hwu.  
GPU clusters for high performance computing.  
In Cluster Computing and Workshops, 2009. CLUSTER '09. IEEE International Conference on, pages 1-8, 2009.

John E. Stone, David J. Hardy, Ivan S. Ufimtsev, and Klaus Schulten.  
GPU-accelerated molecular modeling coming of age.  
J. Mol. Graph. Model., 29:116-125, 2010.

John E. Stone, David Gohara, and Guochun Shi.  
OpenCL: A parallel programming standard for heterogeneous computing systems.  
Comput. in Sci. and Eng., 12:66-73, 2010.

Jeremy Enos, Craig Steffen, Joshi Fullop, Michael Showerman, Guochun Shi, Kenneth Esler, Volodymyr Kindratenko, John E. Stone, and James C. Phillips.  
Quantifying the impact of GPUs on performance and energy efficiency in HPC clusters.  
In International Conference on Green Computing, pages 317-324, 2010.

John E. Stone, David J. Hardy, Barry Isralewitz, and Klaus Schulten. GPU algorithms for molecular modeling. In Jack Dongarra, David A. Bader, and Jakub Kurzak, editors, *Scientific Computing with Multicore and Accelerators*, chapter 16, pages 351-371. Chapman & Hall/CRC Press, 2011.

David J. Hardy, Zhe Wu, James C. Phillips, John E. Stone, Robert D. Skeel, and Klaus Schulten. Multilevel summation method for electrostatic force evaluation. *J. Chem. Theor. Comp.*, 11:766-779, 2015.

John E. Stone, Ryan McGreevy, Barry Isralewitz, and Klaus Schulten. GPU-accelerated analysis and visualization of large structures solved by molecular dynamics flexible fitting. *Faraday Discuss.*, 169:265-283, 2014.

Abhishek Singharoy, Ivan Teo, Ryan McGreevy, John E. Stone, Jianhua Zhao, and Klaus Schulten. Molecular dynamics-based refinement and validation with Resolution Exchange MDFF for sub-5 Å cryo-electron microscopy maps. *eLife*, 10.7554/eLife.16105, 2016. (66 pages).

John E. Stone, Juan R. Perilla, C. Keith Cassidy, and Klaus Schulten. GPU-accelerated molecular dynamics clustering analysis with OpenACC. In Robert Farber, editor, *Parallel Programming with OpenACC*, pages 215-240. Morgan Kaufmann, Cambridge, MA, 2016.

John E. Stone, Jan Saam, David J. Hardy, Kirby L. Vandivort, Wen-mei W. Hwu, and Klaus Schulten. High performance computation and interactive display of molecular orbitals on GPUs and multi-core CPUs. In *Proceedings of the 2nd Workshop on General-Purpose Processing on Graphics Processing Units*, ACM International Conference Proceeding Series, volume 383, pages 9-18, New York, NY, USA, 2009. ACM.

John E. Stone, David J. Hardy, Jan Saam, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. GPU-accelerated computation and interactive display of molecular orbitals. In Wen-mei Hwu, editor, GPU Computing Gems, chapter 1, pages 5-18. Morgan Kaufmann Publishers, 2011.

John E. Stone, Michael J. Hallock, James C. Phillips, Joseph R. Peterson, Zaida Luthey-Schulten, and Klaus Schulten. Evaluation of emerging energy-efficient heterogeneous computing platforms for biomolecular and cellular simulation workloads. 2016 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW), pages 89-100, 2016.

John E. Stone, Antti-Pekka Hynninen, James C. Phillips, and Klaus Schulten. Early experiences porting the NAMD and VMD molecular simulation and analysis software to GPU-accelerated OpenPOWER platforms. Lect. Notes in Comp. Sci., 9945:188-206, 2016.

Michael Krone, John E. Stone, Thomas Ertl, and Klaus Schulten. Fast visualization of Gaussian density surfaces for molecular dynamics and particle system trajectories. In EuroVis - Short Papers 2012, pages 67-71, 2012.

Elijah Roberts, John E. Stone, and Zaida Luthey-Schulten. Lattice microbes: High-performance stochastic simulation method for the reaction-diffusion master equation. J. Comp. Chem., 34:245-255, 2013.

#### Bibliografía Software Rasmol

Structures et fonctions des molécules biologiques. Utilisations pédagogiques des visualisations tridimensionnelles avec Rasmol. J. Barrère, J-Y Dupont and N. Salamé. INRP, 1997, 128 pages.

Surprising similarities in structure comparison. Jean-François Gilbrat, Thomas Madej, and Stephen H. Bryant. Current Opinion in Structural Biology 6:377-385, 1996. A review of early results of searching for similarities in structure, regardless of sequence similarities. Describes the Vector Alignment Search Tool (VAST) provided by the US National Center for Biotechnology Information.

GlaxoWellcome and MDL become entangled in the Web, by John Hodgson, *Nature Biotechnology* 14:690, June 1996. This article concerning RasMol and Chime is full of [errors](#). See the [editorial comment](#).

[A Dynamic Look at Structures: WWW-Entrez and the Molecular Modeling Database](#), by Christopher W. V. Hogue, Hitomi Ohkawa and Stephen H. Bryant. *Trends in Biochemical Sciences*, 21:226-9, 1996. All PDB files have been converted to the WWW-Entrez format ASN.1. This format can handle a broader range of 3D structural information, including for example models from electron microscopy. WWW-Entrez links 3D structural information with GenBank sequences and MEDLINE abstracts. Related structures can be identified. Kinemage animations are generated automatically to reveal information buried in PDB files, such as thermal factors, disordered zones, and multiple NMR models.

RasMol: Biomolecular graphics for all, by Roger A. Sayle and E. James Milner-White, *Trends in Biochemical Sciences* 20(Sept):374-376, 1995. RasMol was first widely distributed via the Internet in June, 1993, but this is the original paper publication describing RasMol.

[Hyperactive Molecules and the World-Wide-Web Information System](#), by Omer Casher, Gudge K. Chandramohan, Martin J. Hargreaves, Christopher Leach, Peter Murray-Rust, Henry S. Rzepa, Roger A. Sayle and Benjamin J. Whitaker. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1995, 7. This paper proposes sharing chemical data too bulky for journal publication via World Wide Web. To accomplish this, it introduces various new chemical MIME (Multipurpose Internet Mail Extension) types, including chemical/x-csml for the Chemical Structure Markup Language which can be understood by RasMol.

Software for viewing biomolecules in three dimensions on the Internet, by Alvaro Sanchez-Ferrer, Estrella Nunez-Delicado, and Roque Bru, *Trends in Biochemical Sciences* 20(July):286-288, 1995. Compares RasMol 2.5, pdVwin, Pkin\_2\_4/Mage\_2\_4, Hyperchem 3.0.

Utilisations pédagogiques des visualisations tridimensionnelles de molécules en biologie, by J. Barrère, J.-Y. Dupont, and N. Salamé, in *Images numériques dan l'enseignement des sciences*, Journées d'études CNAM, June 1995, J. C. Le Touzé and N. Salamé, eds., Institut Nationale de Recherche Pédagogique, pp. 87-93. A brief introduction to the use of RasMol for educational molecular visualization of DNA and proteins, touching on hemoglobin and the active site of carboxypeptidase. Illustrated.

Logiciels de visualisation tridimensionnelle de molécules, by J. Barrère, J.-Y. Dupont, and N. Salamé, *Activités Pratiques Biologie Géologie Bull.* 4:725-753, 1995. Introduces RasMol and MAGE. Proposes detailed tutorials on DNA,

hemoglobin with the sickle mutation and hemoglobin evolution, antibody structure, and lysozyme evolution. Extensively illustrated.

Kinemages: make your own molecules for teaching, by Charles W. Sokolik, Trends in Biochemical Sciences 20(March):122-4, 1995.

Kinemages -- simple macromolecular graphics for interactive teaching and publication, by David C. Richardson and Jane S. Richardson, Trends in Biochemical Sciences 19(March):135-8, 1994.

Looking at proteins: representations, folding, packing, and design. Biophysical Society National Lecture. Richardson, J. S., Richardson, D. C., Tweedy, N. B., Gernert, K. M., Quinn, T. P., Hect, M. H., Erickson, B. W., Yan, Y., McClain, R. D., Donlan, M. E., and Surlis, M. C. Biophysical Journal 63(November):1186-1209, 1992. This is the paper which begins famously "Protein crystallography is rather like a dog chasing cars." A fascinating and entertaining tour of protein structure, making comparisons to origami, an Italian castle, and a Greek vase. Another incisive quote:

CPK models are very informative during the process of putting them together, but the completed models all look alike. Computer versions of CPK models have successfully imitated their appearance and most of their disadvantages (the fact that the inside is completely hidden, and the difficulty of identifying an atom or group), without, so far, imitating the real virtue of CPK's, which is the physical "feel" for the bumps, constraints, and degrees of freedom one obtains by manipulating them.

The Kinemage: A tool for scientific communication, by David C. Richardson, and Jane S. Richardson, Protein Science 1:3-9, 1992.

Feynman. R, There's Plenty of Room at the Bottom, American Physical Society, 1959. H.D. Gilbert, Miniaturization Reinhold Publishing Corp, N.Y, 1961,282. <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>. 2 N. Taniguchi, "On the Basic Concept of Nanotechnology", Proc.Intl.Conf.Prod.Eng, Tokyo 1974, 18. 3 T. Theis, D. Parr, P. Binks, J. Ying, K. E.

Drexler, E. Schepers, K. Mullis, C. Bai, J. J. Boland, R. Langer, P. Dobson, C. N. R. Rao, M. Ferrari, , Nat.Nanotech. 2006,1,8. 4 J. J. Ramsden, Nanotechnology: An Introduction, Elsevier, Amsterdam, 2011. 5 (a) G. Binnig, H. Rohrer, IBM Journal of Research and Development 1986,30,355. (b) G.

Binnig, H. Rohrer, Rev. Mod. Phys. 1987, 59,615. 6 D. Eigler, E. Schweizer, Nature 1990,344,.524. 7

[http://researcher.watson.ibm.com/researcher/view\\_group.php?id=42458](http://researcher.watson.ibm.com/researcher/view_group.php?id=42458) (a) C. P. Poole Jr., F. J.

Owens, Introduction To Nanotechnology, John Wiley & Sons, New Jersey, 2003.  
(b) R. Kelsall, I. W. Hamley, M. Geoghegan, Nanoscale Science and Technology, John Wiley & Sons, UK, 2005. 9 (a) M.

Pagliari, Nano-Age: How Nanotechnology Changes our Future, Wiley-VCH, Weinheim 2010 (b) J. J.

Ramsden, Applied Nanotechnology. The Conversion of Research Results to Products, Elsevier, Amsterdam, 2014

V.V. Pokropivny, V.V. Skorokhod, Mater.Sci.Eng.C 2007,27,990. (b) K.  
Ariga, M. Li, G. J. Richards, J. P. Hill, J. Nanosci.Nanotechnol.2011,11,1. 11 (a) M. Wautelet, Eur. J. Phys. 2001

E. Roduner, Chem. Soc. Rev. 2006, 35, 583. (c) G. Hodes, Adv. Mater. 2007, 19, 639. 12 C. Baia, M. Liub, Nano Today 2012,7,258. 13 (a) B. D. Gates, Q. Xu, M. Stewart, D. Ryan, C. G. Willson, G. M. Whitesides, Chem. Rev. 2005, 105, 1171.  
(b) M. J. Köhler, W. Fritzsche, Nanotechnology: An Introduction to Nanostructuring Techniques, 2nd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

The Royal Society & The Royal Academy of Engineering, Nanoscience and nanotechnologies: opportunities and uncertainties, London, 2004 (<http://www.nanotec.org.uk/finalReport.htm>).

T. Ito, S. Okazaki, Nature 2000,406,1027.

Basnar, I. Willner, Small 2009,5,28.

G. Cao, Nanostructures and nanomaterials, Imperial College Press, London, UK, 2009.

Nicolosi, M. Chhowalla, M. G. Kanatzidis, M. S. Strano, J. N. Coleman, Science 2013,340,1420.

## ANEXOS

### **Anexo 1 Nanomateriales**

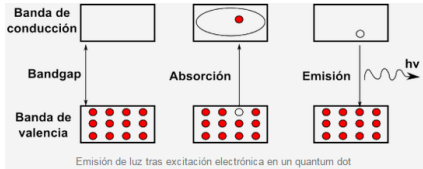
Sabía usted que es posible utilizar una nanofibra excepcionalmente delgada, fuerte y resistente de poliacrilonitrilo, que podría conducir a la fabricación de mejores piezas para infinidad de máquinas, enseres y vehículos, desde aviones hasta puentes, pasando por puentes e incluso chalecos antibalas. O que Los científicos creen que los nanotubos de carbono permitirán construir en el futuro (quizás en la próxima década) dispositivos electrónicos más pequeños, rápidos y que consuman menos energía que los que utilizan chips de silicio. Pues bien, la nanofibra y los nanotubos de carbono son nanomateriales.

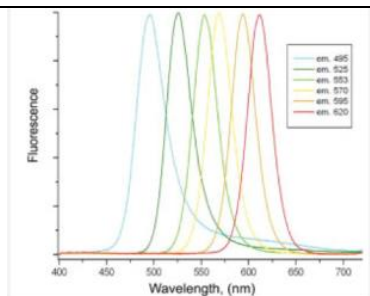
En la siguiente tabla se compila una pequeña investigación de los nanomateriales



Tabla 12. Nanomateriales

Nanomaterial	Fecha de Fabricación, síntesis o descubrimiento	Dimensión	Características	Aplicaciones
<p><b>Puntos cuánticos</b> (qdots o quantum dots en inglés).</p> <p>Conocidos también como átomos artificiales, son semiconductores en la escala nanométrica usados como pruebas fluorescentes en microscopia (de luz y microscopia electrónica).</p> <p>Los principales materiales semiconductores de los que están hechos los puntos cuánticos son CdSe, CdS, CdTe, InP, ZnS y PbS, ya que éstos poseen unas propiedades electrónicas adecuadas para obtener puntos cuánticos fluorescentes, pero cada uno de estos materiales tienen unas propiedades diferentes como estructura, toxicidad (por liberación de metales), comportamiento óptico o capacidad para unir grupos funcionales a su superficie.</p> <p>Los puntos cuánticos pueden estar formados por un solo</p>	<p>Los puntos cuánticos se descubrieron en 1980. por Alexei Ekimov y Louis Brus</p> <p>Se descubrieron accidentalmente los puntos cuánticos de luz blanca en un laboratorio de química en la Universidad Vanderbilt, en Nashville, Tennessee, Estados Unidos, su eficiencia era demasiado baja para aplicaciones comerciales, y varios expertos predijeron que sería imposible elevarla a niveles prácticos. Sin embargo, un equipo de investigadores de esa universidad ha demostrado ahora que esas predicciones estaban equivocadas. Este equipo ha logrado aumentar con éxito la eficiencia de la fluorescencia de estos nanocristales desde el nivel original del 3 por ciento hasta uno tan alto como el 45 por ciento.</p> <p>Como otros nanomateriales, la mayor parte de sus átomos están en su superficie, por lo que la relación superficie-volumen de los puntos cuánticos es muy elevada, algo que, junto al confinamiento cuántico, influye en que sus propiedades sean muy diferentes a las de los materiales macroscópicos.</p> <p>El confinamiento cuántico ocurre cuando los electrones están restringidos a moverse en una región muy pequeña, como es el caso de los puntos cuánticos menores de 10 nm. Este efecto hace que las propiedades electrónicas y ópticas de los puntos cuánticos sean determinadas por su tamaño.</p> <p>Un semiconductor posee una banda</p>	<p>Estos puntos cuánticos pueden contener tan sólo 100 a 100.000 átomos dentro del volumen de punto cuántico, con un diámetro de 10 a 50 átomos. <b>Esto corresponde a alrededor de 2 a 10 nanómetros y 10 nm de diámetro</b>, casi 3 millones cuántica podrían alinear puntos end to end y encajar dentro del ancho de un pulgar humano.</p>	<p>Los puntos cuánticos son nanocristales compuestos de materiales semiconductores inorgánicos, como CdSe, InGaP, carbón y silicón, en el cual se pueden crear y confinar pares de hoyo-electrón.</p> <p>Cuando los puntos cuánticos se exponen a la luz, los pares de hoyo-electrón se excitan y son fluorescentes. La longitud de onda de emisión está relacionada al tamaño del punto cuántico – entre más grande sea mayor la emisión de la longitud de onda (para la misma longitud de onda de excitación). Durante la fabricación, el tamaño del punto cuántico se puede determinar con precisión nanométrica para crear una serie de puntos cuánticos con distintas características de emisión. Por ejemplo, un punto cuántico de CdSe de 3nm emite a 520nm (verde)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Optoelectrónica.</b> Con los puntos cuánticos de materiales semiconductores, como arseniuro de indio y fósforo de indio, se fabrican diodos láser emisores de luz más eficientes que los usados hoy en lectores de CD, de códigos de barras y demás. Así que se espera que acaben sustituyéndolos a corto o medio plazo.</li> <li>• <b>Biomedicina.</b> En este caso, los puntos cuánticos no están integrados en una matriz, sino que son cristales independientes, pero su fundamento y sus propiedades físicas son las mismas. Los puntos cuánticos emiten luz brillante y muy estable. Con ellos se obtienen imágenes de mucho contraste usando láseres menos potentes, y no existe el temor de que se apaguen. Además, la longitud de onda tan específica a la que brillan evita las superposiciones, y permite teñir a la vez muchas más estructuras que con los métodos de tinción tradicionales. Por ejemplo en rastreo y visualización de estructuras profundas en los tejidos. En combinación con imagen confocal, los puntos cuánticos habilitan alta resolución, imagen 3-D dentro de tejidos vivos. La fluorescencia con brillantez excepcional de los puntos cuánticos habilitan la observación de un solo punto cuántico y monitorearlo a través del tiempo.</li> <li>• <b>Paneles solares experimentales.</b> La tercera generación de células fotovoltaicas usa entre otras posibilidades las superficies con puntos cuánticos. El rendimiento es mayor que las células de primera y segunda generación y su fabricación es más barata. Los puntos cuánticos son de manufacturación barata, y pueden hacer su trabajo en combinación</li> </ul>

<p>semiconductor o por una mezcla de ellos en un sistema core-shell.</p>	<p>energética llena de electrones (banda de valencia) y una banda energética vacía (banda de conducción) separadas por una diferencia de energía (<b>bandgap</b>). Esta diferencia de energía es mayor que para un material conductor y menor que para un material aislante. <b>Un proceso de luminiscencia consiste, básicamente,</b> en la excitación de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción y el regreso de ese electrón a la banda de valencia con la consiguiente emisión de un fotón con energía igual al bandgap. Como en los puntos cuánticos el bandgap es variable con el tamaño del puntos cuánticos, el color del fotón emitido será función de ese tamaño. La excitación de un electrón en los puntos cuánticos se puede producir por absorción de luz de varias energías (espectro de absorción ancho).</p>  <p>Emisión de luz tras excitación electrónica en un quantum dot</p> <p><b>En resumen,</b> los puntos cuánticos absorben luz de un continuo de energías, pero emiten luz de energías discretas (un solo color) que depende de su tamaño. Por otra parte, la intensidad fluorescente es mayor que para los fluoróforos convencionales.</p>		<p>mientras que uno de 5.5 emite a 630nm (rojo). Los puntos cuánticos usualmente se cubren en sulfuro de zinc para mejorar la intensidad fluorescente (al confinar más los pares electrón-hoyo) y después se cubren en un escudo soluble al agua, biocompatible para habilitar la entrada y retención por las células. Los puntos cuánticos brinda más sensibilidad en imágenes de células vivas comparado con los fluoróforos orgánicos convencionales: la imagen puede ser 1000 más brillante. Los puntos cuánticos también tienen la ventaja de que ellos no se foto-blanquean con la exposición de la luz, permitiendo detección simultánea e imagen multicolor.</p>	<p>con materiales como conductores polímeros, que también son de producción barata. Un punto polímero cuántico funcionando podría colocar, eventualmente, a la electricidad solar en una posición económica igual a la electricidad del carbón. Si esto pudiera hacerse, sería revolucionario. Una célula comercial de punto cuántico solar está aún años de distancia, asumiendo que sea posible. Pero si lo es, ayudaría a superar el presente de combustibles fósiles.</p>
--	--	--	--	---

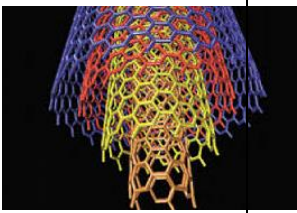
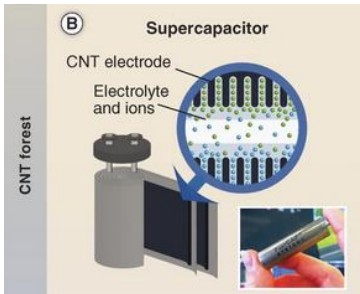
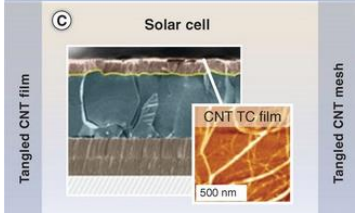


Fluorescencia de puntos cuánticos de diferentes tamaños, las partículas de la disolución de la izquierda son las más pequeñas.

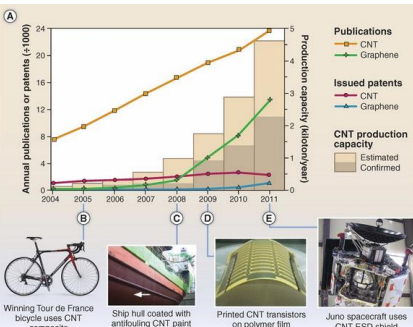
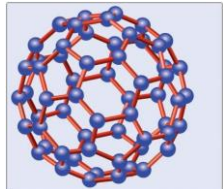
#### ¿Cómo se sintetiza un Punto Cuántico?

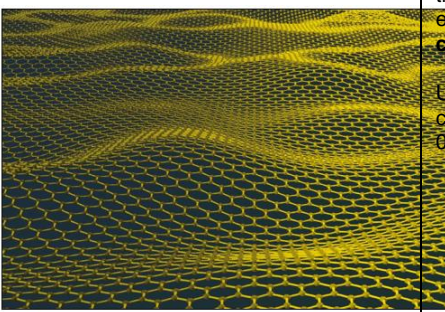
El procedimiento más simple y universalmente seguido es la síntesis coloidal o también denominada síntesis orgánica. Con el uso de soluciones madre de Selenio, Teluro, Sulfuro u otros y mediante pirólisis en un solvente de coordinación muy caliente como el TOP o TOPO, se obtienen puntos cuánticos de alta calidad, tal como los formados por CdTe, CdSe, CdS y derivados. Esta cobertura de TOP o TOPO evita procesos de agregación. Por otra parte, el proceso de síntesis puede ser mejorado sustituyendo el Cd (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> por CdO como donador del Cadmio. En general, los puntos cuánticos resultantes de la síntesis coloidal presentan una excelente cristalinidad y bajísimos defectos

	<p>estructurales.</p> <p>Otra ruta para constituir nanocristales de CdTe se denomina fase acuosa. Se basa en la reacción de sales metálicas (NaHTe, NaHSe o sales de Cadmio) que, junto con compuestos tiónicos (como reactivos para cubrir el puntos cuánticos), mercaptoetanol y tioglicerol estabilizan el nanocristal. En este caso, se emplea Al<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> como fuente de H<sub>2</sub>Te. Por este proceder también se han obtenido nanocristales de CdSe, CdTe y HeTe. El uso de altas temperaturas empleando el microondas mejora sensiblemente el campo cuántico y logra acortar los tiempos de síntesis. Comparativamente con la síntesis orgánica, la acuosa resulta más barata y sencilla, obteniéndose cristales de baja toxicidad, solubles en agua y estables. Partiendo de puntos cuánticos producidos por síntesis coloidal, para biocompatibilizarlos se encapsulan con polímeros anfifílicos que los solubilizan en agua, haciéndolos resistentes a la degradación por enzimas o agentes químicos.</p> <p>En Biomedicina los puntos cuánticos suelen emplearse como estructuras individuales organizadas en complejos de dos o tres dimensiones, conservando sus propiedades físicas y su naturaleza como cristales semiconductores. Pero su utilización más general creó la necesidad de nuevas formas de organización. Así, surgió la idea de conectarlos en hileras, fabricando "alambres" con diversas conformaciones para emplearlos como estructuras moleculares activas, tanto eléctrica como ópticamente. Un paso más allá supuso la creación de láminas poliméricas, en donde los puntos cuánticos se estructuran en organizaciones complejas bi y tridimensionales. Estas últimas se construyen superponiendo varias láminas consecutivas de puntos cuánticos sobre una base cristalina.</p>			
--	---	--	--	--

<p><b>Nanotubos de carbono</b> En química, se denominan nanotubos a estructuras tubulares cuyo diámetro es del orden del nanómetro (nm). Un nanómetro equivale en escala a la billonésima parte de un metro (<math>1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}</math>). Existen nanotubos de muchos materiales, tales como silicio o nitruro de boro, pero generalmente el término se aplica a los nanotubos de carbono o CNTs (Carbon Nanotubes).</p>	<p><b>Fecha de Fabricación:</b> Los nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT – Multiwall Carbon Nanotubes) fueron descubiertos en 1991 por Sumio Iijima, un ingeniero japonés de la empresa NEC. Desde el principio mostraron importantes efectos cuánticos debidos a su estructura casi unidimensional, lo que incentivó a numerosos científicos a trabajar en ellos. Los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT – Single Wall Carbon Nanotubes) se descubrieron dos años después por el grupo de Iijima en NEC y por otro grupo en el IBM Almaden Laboratory.</p> <p><b>Síntesis o descubrimiento:</b> Los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNT – Single Wall Carbon Nanotubes) están constituidos por átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal cilíndrica, de forma que su estructura es la misma que se obtendría si se enrollara sobre sí misma una lámina de grafito. Sus extremos pueden estar cerrados por media esfera de fullereno o pueden estar abiertos. Los nanotubos de carbono de pared múltiple (MWCNT – Multiwall Carbon Nanotubes) tienen una estructura similar a varios SWCNT concéntricos con diferentes diámetros. En ambos casos su principal característica, que dará lugar a un buen número de propiedades excepcionales, es que muestran una relación longitud/diámetro muy elevada.</p>	<p><b>Dimensión</b> Su diámetro es del orden de los nanómetros y su longitud puede variar desde unas micras hasta milímetros e incluso algunos centímetros.</p>  <p>Fig. nanotubos multicapa</p> <p>Dependiendo del grado de enrollamiento, y la manera como se conforma la lámina original, el resultado puede llevar a nanotubos de distinto diámetro y geometría interna. Su espesor puede ser de unos 50 átomos de ancho y su grosor solo de un átomo.</p>	<p><b>Características</b> Es cien veces más fuerte que el acero y entre seis y diez veces más ligero. Además, es elástico.</p>	<p><b>Aplicaciones</b></p> <p><b>1. Electroquímicas: Supercondensadores, almacenamiento de hidrógeno y Celdas solares.</b></p>  <p><b>2. Electrónica: Transistores y memorias</b></p> 

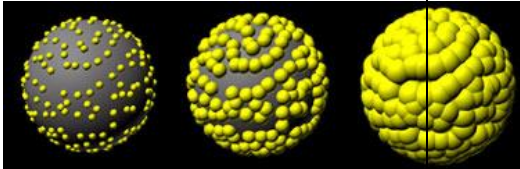
				<p>En microelectrónica ya se ha propuesto el uso</p>  <p>de los nanotubos en aplicaciones tan diversas como transistores TFT flexibles, memorias no volátiles (NRAM), conectares verticales de solo 150 nm compatibles con la tecnología CMOS y disipadores térmicos de calor para amplificadores de alta potencia.</p> <p><b>3. Nanotubos en medicina</b></p> <p><b>4. Terapia genética</b></p> <p><b>5. Aplicaciones Industriales:</b> Se utiliza ya en la fabricación de determinados productos de uso cotidiano. por ejemplo artículos deportivos como pueden ser bicicletas o raquetas. No es necesario que el artículo esté íntegramente fabricado a base de nanotubos de carbono, sino que basta con añadir una</p>
--	--	--	--	---

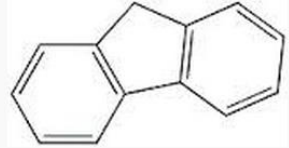
				<p>serie de trazas para que el producto resultante sea más ligero y resistente.</p> <p>En el campo de la construcción a gran escala, todavía no ha llegado al mercado, pero es de esperar que las estructuras del futuro</p>  <p>incorporen el material para aprovechar sus propiedades.</p>
<p><b>Fullereno</b> Son la tercera forma alotrópica del carbono, junto con el diamante y el grafito.</p>  <p>Fig. C60 el principal Fullereno</p>	<p><b>Fecha de Fabricación:</b> La primera vez que se encontró un fullereno fue en 1985</p> <p><b>síntesis o descubrimiento:</b> Hasta el siglo XX, el grafito y el diamante eran las únicas formas alotrópicas conocidas del carbono. En experimentos de espectroscopia molecular, se observaron picos que correspondían a moléculas con una masa molecular exacta de 60, 70 ó más átomos de carbono. Harold Kroto, de la Universidad de Sussex, James Heath, Sean O'Brien, Robert Curl y Richard Smalley, de la Universidad de Rice, descubrieron el C60 y otros fullerenos en 1985, en un experimento que consistió en hacer incidir un rayo láser sobre un trozo de grafito. Ellos esperaban efectivamente descubrir nuevos alótropos del carbono, pero suponían que serían</p>	<p><b>Dimensión:</b> Los fullerenos (habitualmente con un tamaño cercano a <b>1 nm</b>) se asocian espontáneamente formando agregados de varias moléculas que alcanzan tamaños desde 10 nm hasta varias micras.</p>	<p><b>Características:</b> La forma cerrada y altamente simétrica de los fullerenos tiene como consecuencia que sean estructuras de gran resistencia física: bajo presiones extremas —como 3.000 atm— se deforman, pero regresan a su estructura inicial al relajar la presión. Por ello su adición a algunos materiales poliméricos les aporta resistencia</p>	<p><b>Aplicaciones:</b> Se han propuesto numerosas aplicaciones potenciales para los fullerenos, aunque su utilización real avanza más lentamente. Cabe citar la química de síntesis, como catalizadores, la fabricación de células solares, en fotodetectores de rayos X, en telecomunicaciones, como recolectores de radicales libres, en pilas de combustible... Dado que sus propiedades ópticas cambian mucho al exponerse a la luz, se propone también su uso en dispositivos fotónicos. Se ha sugerido incluso su uso como inhibidor de la proteasa del virus de inmunodeficiencia humana (VIH), cuyo sitio activo tiene forma cilíndrica con un diámetro similar al del fullereno C60 y está recubierto casi exclusivamente por residuos aminoácidos hidrófobos, un entorno favorable para la fijación del fullereno, que bloquea así el centro activo e impide la propagación del virus.</p>

	<p>moléculas largas, en lugar de las formas esféricas y cilíndricas que encontraron. A Kroto, Curl y a Smalley se les concedió el premio Nobel de Química en 1996, por su colaboración en el descubrimiento de esta clase de compuestos. El C60 y otros fullerenos fueron más adelante observados fuera del laboratorio (ej. en el hollín de una vela). Hacia el año 1991, era relativamente fácil producir unos cuantos gramos de polvo de fullereno usando las técnicas de Donald Huffman y Wolfgang Krätschmer. La purificación del fullereno era un desafío para los químicos hasta hace poco cuando un equipo de investigadores españoles desarrolló un nuevo proceso de obtención.<sup>2</sup> Los fullerenos endoédricos han incorporado, entre los átomos de la red, iones u otras moléculas más pequeñas. El fullereno es un reactivo habitual en muchas reacciones orgánicas como por ejemplo en la reacción de Bingel, descubierta en 1993.</p>			
<p><b>Grafeno</b></p> <p>Es una sustancia formada por carbono puro, con átomos dispuestos en patrón regular hexagonal, similar al grafito, pero en una hoja de un átomo de espesor.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación:</b> Fue sintetizado por primera vez en 2004, saltó a la fama en 2010 cuando sus descubridores, los investigadores de origen ruso Andre Geim y Konstantin Novoselov recibieron el Premio Nobel de Física.</p>  <p><b>Grafeno.</b> La lámina casi perfecta tiene un espesor de sólo un átomo. Consiste en átomos de carbono unidos en forma hexagonal formando un patrón parecido al de un panel.</p>	<p><b>Dimensión:</b> En su caso, el material de moda por excelencia, es de tipo bidimensional. En esencia, es como una lámina de papel, transparente y con el espesor de <b>una única capa atómica.</b></p> <p>Una lámina de 1 metro cuadrado pesa tan sólo 0,77 miligramos.</p>	<p><b>Características:</b> Se considera 200 veces más fuerte que el acero y su densidad es aproximadamente la misma que la de la fibra de carbono, siendo, aproximadamente, 5 veces más ligero que el acero.</p> <p>Al ser un material ultraligero, extraordinariamente resistente, flexible, impermeable, económico, excelente conductor del calor y la electricidad (mejor que ningún otro metal), es un candidato ideal para</p>	<p><b>Aplicaciones en electrónica:</b> Cables de alta velocidad, Súper-baterías (donde a través de su <b>capacidad para almacenar energía puede dotar a las baterías de una mayor duración y un menor tiempo de carga</b>), Pantallas táctiles flexibles, Audífonos y altavoces más que profesionales, <b>ordenadores, coches, teléfonos móviles y equipos de música</b></p> <p>Cámaras fotográficas mil veces más sensibles.</p> <p><b>Aplicaciones de desalinización del agua:</b> Está en fase de investigación el uso de una lámina de grafeno con poros de 1,8 nm para</p>



	<p><b>síntesis o descubrimiento:</b> Geim, de nacionalidad holandesa, y Novoselov, británico-ruso, obtuvieron el grafeno a partir del grafito normal, el material de las minas de los lápices, y lograron una lámina de un grosor de solo un átomo. Muchos pensaban entonces que era imposible que un material así fuera estable. Sin embargo, a partir de los trabajos de estos dos científicos, los físicos pueden estudiar ahora una nueva clase de materiales bidimensionales con propiedades únicas.</p>  <p>Óxido de grafeno y grafeno en polvo.   Graphenea.</p>		<p>desarrollar dispositivos tales como sensores miniaturizados que permiten detectar moléculas químicas y biológicas; con aplicaciones en diversos campos.</p>	<p>sustituir las membranas en el proceso de ósmosis inversa para la desalinización del agua. Según las investigaciones actuales se obtendrían eficiencias mucho mayores que con las membranas actuales, y se tendrían requerimientos menores de energía. En el estado actual, el inconveniente es el costo de las membranas de grafeno, pero se espera que en el futuro estos costos puedan ser reducidos.</p> <p><b>Otras aplicaciones:</b> Por sus propiedades, el grafeno puede servir como material en la fabricación de aviones, satélites espaciales o automóviles, haciéndolos más seguros. También en la construcción de edificios, pues los convertiría en más resistentes. Incluso contribuir a <b>mejorar el medio ambiente</b> sustituyendo a materiales contaminantes que hoy en día nos vemos obligados a utilizar.</p> <p>No hay que olvidar su relevancia en el ámbito de la <b>salud</b>. <b>Las prótesis</b> de grafeno podrían sustituir a las actuales, de diversos materiales. O incluso se podría aplicar para <b>mejorar el tratamiento de algunas enfermedades</b>.</p>
<p><b>Nanoshell</b> Es un tipo de nanopartícula esférica que consta de un núcleo dieléctrico que está cubierto por una cáscara metálica delgada (normalmente de oro). Estas nanocápsulas</p>	<p><b>Fecha de Fabricación</b> <b>Síntesis o descubrimiento:</b> Las propiedades de los nanoshells fueron inicialmente predichas por Aden y Kerker en el año 1951 y posteriormente en el año 1989 se realizaron estudios teóricos por Neeves y Birnboim. <b>No obstante, la invención, el desarrollo experimental y la fabricación de estas entidades estuvo</b></p>	<p><b>Dimensión:</b> Un nanoshell tiene las siguientes dimensiones: De unos 8 a 10 nanómetros que recubre una estructura esférica de silicio de un diámetro aproximado de unos 100 nanómetros.</p>	<p><b>Características:</b> Los nanoshells poseen la capacidad de absorber o repartir rayos de luz a la longitud de onda deseada, lo que les confiere una propiedad de luminiscencia reactiva,</p>	<p><b>Aplicaciones:</b> <b>El tratamiento del cáncer.</b> Las propiedades de las nanoshells son aplicables en la localización, reconocimiento y destrucción termal de células cancerígenas específicas y de angiogénesis particulares en la proliferación tumoral, utilizando un láser infrarrojo que penetra los tejidos y sangre sin</p>

<p>implican una cuasipartícula llamada plasmón que es una excitación colectiva o cuántica oscilación de plasma donde los electrones oscilan simultáneamente con respecto a todos los iones.</p>	<p><b>a cargo de J. Naomi Halas en el año 1990</b> en la Universidad de Rice.</p> <p>El descubrimiento de la nanoshell hecho por la profesora J. Naomi Halas y su equipo en la Universidad de Rice fue galardonado en 2003 como Mejor Descubrimiento de Nanotecnología.</p>  <p>Fig. La simulación por ordenador representa un crecimiento de nanoshell oro con núcleo de sílice y otra capa de oro.</p>	<p>que en determinado momento si la fuente de luz persiste durante cierto tiempo, induciría a los nanoshells a incrementar su temperatura hasta valores suficientes como para "destruir" células enfermas y/o generar procesos acelerados de escarificación/reconstrucción tisular (Giraldo Gallo., et. al., 2007). Los nanoshells poseen cualidades de nanoestructuras ya que en sus superficies pueden ser acoplados diferentes tipos de nanodispositivos, pero a su vez y dependiendo del dispositivo acoplado a su superficie asume la cualidad de biosensor al poseer la capacidad de localizar e identificar selectivamente sustancias, microorganismos y/o células con determinadas características y/o propiedades. Como consecuencia, las nanopartículas nanoshell, ofrecen una plataforma tecnológica para una amplia variedad de terapias diagnósticas, todas ellas sujetas a la posibilidad de ligar</p>	<p>dificultad para generar la reacción deseada en las nanopartículas. Además los nanoshells sugieren una posible aplicación en la soldadura de tejidos con pérdida de continuidad e integridad tisular, por medio de un rápido cierre "endoscópico" derivado de mecanismos de escarificación por calor de heridas quirúrgicas o graft arteriales. (Giraldo Gallo., et. al., 2007).</p>
---	--	--	--

			a la superficie metálica de una nanoshell, moléculas receptoras específicas a una sustancia u organismo prepatógeno en particular.	
<p><b>Fluoreno</b></p> <p>Como los puntos cuánticos, es un nanomaterial <i>cerodimensional</i> y forma esférica, en este caso obtenido a partir del carbono.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación</b></p> <p>Se descubrió antes que los nanotubos de carbono y el grafeno, y sus descubridores, como ha ocurrido con el nuevo material de moda, también fueron merecedores del Premio Nobel.</p> <p><b>Síntesis, estructura y reactividad</b></p> <p>Aunque fluoreno se obtiene a partir de alquitrán de hulla, que se puede preparar también por deshidrogenación de difenilmetano.</p> <p>La molécula de fluoreno es casi plana, aunque cada uno de los dos anillos de benceno es coplanar con el carbono central 9.</p> <p>El Fluoreno es uno de un grupo de químicos llamados hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP), se encuentran a menudo en grupos de dos o más. Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs) se encuentran naturalmente en el ambiente, pero también pueden ser hechos por el hombre. Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) son sólidos y van en aparentemente de color a blanco o pálido amarillo-verde. Se crean cuando productos como el carbón, petróleo, gas, y la basura son</p>	<p><b>Dimensión:</b></p> <p>Geoméricamente, es una especie de balón que en sus vértices tiene átomos de carbono y en sus aristas enlaces químicos.</p>	<p><b>Características:</b></p> <p>El fluoreno es un hidrocarburo aromático policíclico. Forma cristales blancos que presentan una característica, olor aromático similar al de la naftalina. Tiene un color violeta de fluorescencia, de ahí su nombre.</p>	<p><b>Aplicaciones:</b></p> <p>En su momento, parecía que iba a cambiar el mundo, pero el tiempo ha devuelto a sus defensores a posiciones más realistas.</p> <div data-bbox="1423 618 1793 870" data-label="Chemical-Block"> <p style="text-align: center;"><b>Fluoreno</b></p>  <p><b>Concepto:</b> Es un hidrocarburo polinuclear presente en el alquitrán de la hulla.</p> </div> <p>El Fluoreno es uno de un grupo de químicos llamados hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP). La mayoría de los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) se utilizan para llevar a cabo de investigación.</p> <p><b>El fluoreno se utiliza para hacer tintes, plásticos y pesticidas.</b></p> <p>Su aplicación más relevante, hoy por hoy, es su utilización en el campo de las células solares. El fluoreno ha permitido crear plásticos conductores de electricidad, hito que ha permitido la creación de células solares orgánicas, a base de carbono, y también flexibles. A día de hoy, muchos investigadores siguen trabajando con el fluoreno a nivel de ciencia básica. Sin duda, sus hermanos pequeños, los nanotubos de carbono y el grafeno, le han eclipsado.</p>

	quemados, pero el proceso de combustión no es completo.			
<p><b>Nanocelulosa</b> Es una de las opciones más exóticas y originales entre los nuevos materiales, sobre todo porque su origen está en la madera. Es resistente y, además, igual que el grafeno, posee muchas propiedades electrónicas.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación síntesis o descubrimiento:</b></p> <p>El descubrimiento fue el resultado de tres años de investigación en sociedad de los productores y técnicos de pulpa de celulosa y de papel del Grupo Sappi de Sudáfrica y de la Universidad Napier de Edimburgo en Escocia.</p> <p>Se obtiene a partir de la compresión de fibras vegetales o a través de cultivos naturales donde distintos tipos de bacterias lo producen de forma autónoma, aunque hasta ahora con altos costes y dificultades para generar grandes cantidades de nanocelulosa.</p>	<p><b>Dimensión:</b> La tendencia o magnitud típica del diámetro es de 10 a 20 nanómetros y la de su longitud es de 10 veces o más la de su diámetro</p>	<p><b>Características:</b> Es ligera, fuerte y rígida, y con un alto coeficiente de resistencia respecto a su peso. Además, es estable en cuanto a los cambios de temperatura, tiene propiedades ópticas interesantes (es transparente) y se dilata poco con el calor. Por último, puesto que es una derivada de la celulosa, que es una materia prima que producen las plantas en grandísimas cantidades cada año, es intrínsecamente renovable y respetuosa con el medio ambiente.</p>	<p><b>Aplicaciones:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>✚ <b>Armaduras ligeras y súper resistentes.</b></li> <li>✚ <b>Coches más resistentes y eficientes:</b> Según científicos de la Universidad de Maine, añadiendo solo un 10% de nanocelulosa a la mezcla de un material compuesto cualquiera se consigue aumentar la fuerza de la sustancia final hasta en un 70%, algo de lo que podría beneficiarse entre otros el sector de los transportes, y la industria del automóvil especialmente.</li> <p>Gracias a su ligereza, esto podría ocurrir sin que los coches aumentasen excesivamente de peso, e incluso disminuyendo si la nanocelulosa sustituye a otros materiales más pesados. De esta forma los vehículos no necesitarían consumir más combustible para ser más resistentes y seguros.</p> <li>✚ <b>Usos médicos y sanitarios:</b> La nanocelulosa es altamente absorbente, porosa y se puede moldear al gusto. Esto la hace perfecta para fabricar con ella productos absorbentes como gasas, vendas o incluso tampones. Su carácter biodegradable es una ventaja más para estos usos, así como para emplearla en pequeños implantes, como recambios de válvulas cardíacas, ligamentos artificiales o piezas de articulaciones.</li> <li>✚ <b>Espojas para limpiar vertidos en el</b></li> </ul>

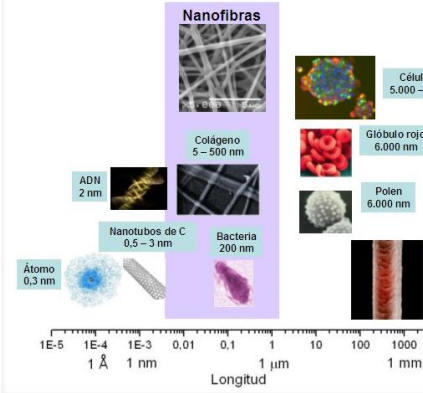


Imagen. Nanocelulosa

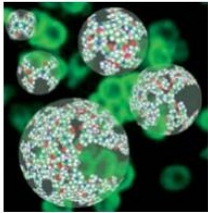
				<p><b>mar:</b> Mezclando nanocelulosas con agua, se obtienen hidrogeles, pero mezclándolas con otros componentes, todos juntos forman aerogeles, que son una especie de esponja, capaces de resistir de forma estable en el agua durante más de 60 días.</p> <p>Ya hay varios laboratorios en el mundo investigando esta propiedad del supermaterial, que sería muy interesante por ejemplo <b>para facilitar las tareas de limpieza tras un vertido contaminante en el agua del mar.</b></p> <p>✚ <b>Mejorar otros materiales como plásticos o papel:</b> La nanocelulosa es un derivado de la celulosa, con la que se fabrica el papel y el cartón. Añadiéndola a su composición, puede reforzar el entramado de fibras que los componen y hacerlos más fuertes y resistentes, por ejemplo al agua o a los impactos y el desgaste. Podría convertirse en un ingrediente interesante para cajas y embalajes que deban resistir en exteriores, o que estén en contacto con materiales grasos, por ejemplo, evitando que se rompan o estropeen.</p> <p>Por sus propiedades, también puede utilizarse para mejorar las cualidades mecánicas de algunos plásticos, como la resina termoplástica o el látex, haciéndolos más flexibles y resistentes. De hecho, científicos brasileños han desarrollado un plástico que, empleando nanocelulosa extraída de plátanos, resultó un 30% menos pesado pero cuatro veces más fuerte que el mismo compuesto sin la nanocelulosa.</p> <p>✚ <b>Biocombustible:</b> Con algas verde-azules modificadas genéticamente se puede crear un subproducto para generar biocombustible.</p>
--	--	--	--	--

<p><b>Películas delgadas</b> También conocidas como láminas delgadas, son estructuras de dos dimensiones, Las películas delgadas son estructuras sólidas, tan delgadas que se puede despreciar muchos efectos físicos en su grosor. La mayoría de las películas delgadas interactúan con ondas, por lo cual su grosor debe ser del orden de la longitud de onda de la perturbación con la que interactúa. Entonces, una estructura rosca plana, de algunos metros de grosor, se puede considerar una película plana si interactúa con una onda de sonido; por ejemplo, ondas sonoras de 1 kHz cuentan con 0.343 metros. Para nuestra tecnología cotidiana, las películas delgadas presentan unas cuantas micras de grosor, es decir, el orden de la longitud de onda de la luz; por ejemplo, la un haz verde es cercano a los 500 nm, es decir, 0.5 micras. En la imagen se muestra un ejemplo claro, una capa de jabón crea franjas multicolores, porque es delgada al capa.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación: síntesis o descubrimiento:</b> Las películas delgadas se utilizaron inicialmente con fines decorativos. En el siglo XVII, los artistas aprendieron a pintar un patrón en un objeto cerámico con una disolución de una sal de plata y calentar después el objeto para causar la descomposición la sal y dejar una película delgada de plata metálica. Hoy día, las películas delgadas se utilizan con fines de decoración o de protección: para formar conductores, resistores y otros tipos de películas en circuitos, microelectrónicas; para formar positivos fotovoltaicos que convierten energía solar en electricidad; y para muchas otras aplicaciones.</p>	<p><b>Dimensión:</b> Las películas delgadas pueden hacerse con cualquier tipo de material, incluidos metales, óxidos metálicos y sustancias orgánicas. El término película delgada no tiene una definición precisa; <b>en general se refiere a películas cuyo espesor va de 0.1 um hasta unos 300 um</b>, y normalmente no se aplica cubrimientos como pinturas o barnices, que suelen ser mucho más gruesos.</p>	<p><b>Características:</b> Las películas delgadas son importantes porque permiten ahorrar energía, son muy compactas, ligeras y debido a que se desprecia una dimensión son más fáciles de caracterizar físicamente.</p> <p><b>Características:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Debe ser químicamente estable en el entorno en el que se usará</li> <li>• Debe adherirse bien a la superficie que cubre (el sustrato).</li> <li>• Debe tener un espesor uniforme.</li> <li>• Debe ser químicamente puro o tener una composición química controlada; y Debe tener una baja densidad de imperfecciones. Además de estas características generales, podrían requerirse propiedades especiales para ciertas aplicaciones. Por ejemplo, la película podría</li> </ul>	<p><b>Aplicaciones:</b> Microelectrónica como conductores, resistores condensadores. (Las películas delgadas son los microcircuitos en las computadoras).</p> <p>También se usan ampliamente como recubrimientos ópticos en lentes (las películas anti-reflejantes en anteojos) para reducir la cantidad de luz reflejada en la superficie del lente y para proteger la lente.</p> <p>Las películas delgadas metálicas se han utilizado desde hace mucho como recubrimientos protectores de metales; por lo regular, se depositan a partir de soluciones empleando corrientes eléctricas, como en el chapeado con plata y el "cromado".</p> <p>Películas delgadas también se usan en Parabrisas y las burbujas de jabón.</p>
---	---	---	---	--

			<p>tener que ser aislante o semiconductor, o poseer propiedades ópticas o magnéticas especiales.</p>	
<p><b>Nanoporos</b>                  Agujeros pequeños de dimensiones nanómetros en una membrana, que se pueden utilizar como detectores de moléculas individuales. Los poros pueden ser biológicos o sintéticos.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación síntesis o descubrimiento:</b>                  En 1953 se inventó en contador Coulter para la contabilización y medición del tamaño de partículas a micro escala dispersas en electrolitos. Que consiste en un voltaje aplicado a través de una pequeña apertura que contiene dos cámaras llenas de electrolitos, las partículas se movían de una cámara a la otra y creaban pulsos de resistencia característicos para cada electrolito. En los 90's, Coulter encontró una manera de extender este principio a un nivel molecular con la introducción de los nanoporos con aperturas limitadas en el rango de 1 a 100nm.</p> <div data-bbox="485 982 978 1203" data-label="Image"> </div>	<p><b>Dimensión:</b>                  El rango de 1 a 100nm</p>	<p><b>Características:</b>                  Fotoluminiscencia a temperatura ambiente en el rango visible.                  Los átomos permanecen en sus posiciones cristalinas originales.                  Gran superficies &gt; Reactividad química.                  Propiedades dependientes de la porosidad (condiciones de preparación): Es posible el patterning en profundidad o lateral.                  Biocompatible.</p>	<p><b>Aplicaciones:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>✓ <b>Detección de ADN</b></li> <li>✓ <b>Sensores:</b></li> </ul> <p>Sensores de gas, Biosensores (basados en propiedades ópticas o de transporte)                  Dispositivos fotovoltaicos.                  Reflectores de Bragg, redes de difracción, cristales fotónicos, filtros, microcavidades ópticas.                  Biocapsulas y dispensadores de drogas.                  Implantes de hueso.                  Retinas sintéticas.                  Generación acústica térmicamente estimulada.                  Microceldas de combustible.                  MEMS, MOEMS, NEMS.</p> <p>La principal aplicación en el mercado es el hecho de conseguir una mayor superficie reactiva con un material nanoporoso, que uno normal. De esta forma utilizando nanoporos en un sensor este será más efectivo ya que estará con más gas en contacto.</p> <p>Esta aplicación es utilizadas para crear cada vez menor volumen y más eficientes.</p> <div data-bbox="1423 1230 1986 1398" data-label="Image"> </div> <p>Fig. ¿Por qué hacer sensores con nanoporos?</p>

<p><b>Nanofibras</b> Es una fibra polimérica con diámetro inferior a 500 nanómetros. Se obtienen a partir de técnicas especiales que permiten obtener esas fibras ultrafinas, de propiedades muy particulares y de muy diversos usos.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación: síntesis o descubrimiento</b></p> <p>El primer científico que intento crear el material fue Von Neuman en los años 40, estudió la posibilidad de crear sistemas de una manera que se auto reproducen. En 1959 Richard Feynmann en una conferencia expresó su inclinación por descubrir cómo manejar objetos átomo por átomo. En el año 1985 se descubrieron las nanopartículas. En 1996 Harry Koto recibió un premio Nobel por el descubrimiento de las nanopartículas. <b>Pero fue años después cuando en el Instituto de Tecnología de Georgia fueron desarrolladas las nanofibras por un equipo al mando de Zhong Lin Wang.</b></p> 	<p><b>Dimensión:</b> La fibra tiene un Diámetro inferior a 500 nanómetros.</p>	<p><b>Características:</b> Las nanofibras presentan alta reactividad superficial, conductividad térmica y eléctrica, y las siguientes propiedades:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Propiedades mecánicas superiores como resultado de su dimensión.</li> <li>• La fibra tiene un efecto piezoeléctrico, un efecto importante que convierte energía mecánica en electricidad.</li> <li>• Flexibilidad.</li> <li>• Tenacidad.</li> <li>• Resistencia a la tracción.</li> <li>• Son hidrofóbicos.</li> <li>• efecto anti microbiano.</li> <li>• barrera térmica.</li> <li>• control de electricidad estática.</li> <li>• transpirabilidad, propia para tejidos inteligentes.</li> <li>• buena solides de colores.</li> <li>• Antillamas.</li> </ul>	<p><b>Aplicaciones:</b> La posibilidad de producir fibras de distintos materiales, con morfología y porosidad a medida, sumado a las excelentes propiedades intrínsecas a su tamaño, hacen que estas estructuras resulten apropiadas para numerosas aplicaciones.</p> <p><b>Dispositivos biomédicos</b> como el sistema de liberación controlada de fármacos o la obtención de cosméticos.</p> <p>También para principios <b>activos e</b> ingeniería de tejidos; prendas de vestir, implementos de limpieza y hasta productos industriales de catálisis, filtrado, barrera y aislamiento, pilas, transistores, óptica, tecnología de la información y del sector espacial.</p>
<p><b>Grafano</b> Es una variante de grafeno, cuya peculiaridad es dado por un átomo de hidrógeno</p>	<p><b>Fecha de Fabricación: síntesis o descubrimiento</b></p> <p>Fue creado en febrero de 2009 por los investigadores Andre Geim y Kostya Novoselov de la Universidad de</p>	<p><b>Dimensión:</b> El Grafano tiene la misma estructura de nido de abeja, salvo que se "pintaron" con átomos de hidrógeno</p>	<p><b>Características:</b> Son muy flexibles, pesan poco y son muy resistentes. <b>El grafano es un</b></p>	<p><b>Aplicaciones:</b> Una de las ventajas de grafano es que podría resultar más fácil de hacer que esas pequeñas tiras de grafeno necesarias para los circuitos electrónicos.</p>



<p>unido a cada átomo de carbono . Tiene la propiedad de ser un aislante.</p>	<p>Manchester , han producido un nuevo y asombroso material: el grafano, derivado del grafeno.</p> <p>El equipo de André Geim y Kostya Novoselov ha buscado conseguir materiales derivados del grafeno incluyendo entre los átomos de carbono átomos de otros elementos, de este modo han obtenido el Grafano intercalando átomos de Hidrógeno y el Fluorografano usando átomos de Fluor.</p>	<p>sus uniones con los de carbono. El resultado de estos vínculos entre los átomos de carbono y los de hidrógeno sujetan de manera eficaz los electrones que hacen del graphene lo que es. <b>Sin embargo, conserva la delgadez grafeno, su super-fuerza, la flexibilidad y la densidad de su elementos químicos mayores.</b></p>	<p><b>aislante</b> a diferencia del grafeno que es un conductor.</p>	<p>El descubrimiento del grafano abre las puertas a muchas otras modificaciones, nuevos materiales que aparecerán al sustituir el hidrógeno por átomos de otro tipo. Por ejemplo, en principio parece posible sustituir el hidrógeno, o parte de él, con flúor, cuyas posibilidades de enlace con el carbono son similares a las del hidrógeno. Así se obtendría un nuevo material (fluorografano) con propiedades diferentes.</p>
<p><b>Dendrimeros</b> Son un tipo de polímeros hiper-ramificados (esto es, moléculas muy grandes, altamente ramificadas, con la característica de que cada rama tiene la misma estructura y peso molecular.</p>	<p><b>Fecha de Fabricación: síntesis o descubrimiento</b></p>  <p><small>FIGURA . Imágenes generadas por ordenador de nanopartículas. Imagen cortesía del Centro Nacional de Nanotecnología Biológica (Center for Biologic Nanotechnology), Universidad de Michigan-Ann Arbor.</small></p> <p>El descubrimiento de los dendrímeros tiene su propia historia. La contó su descubridor, Donald Tomalia, en un artículo publicado en Scientific American en 1995. Decía el investigador que su</p>	<p><b>Dimensión:</b> Los dendrímeros presentan un tamaño tipo nanopartículas.</p>	<p><b>Características:</b> Un dendrímero tiene una estructura química precisa, donde los enlaces químicos entre los átomos pueden ser descritos con exactitud. Están altamente ramificados, pero sus ramas tienen longitudes concretas, y su crecimiento, peso molecular y tamaño puede ser controlado en todo momento. El nombre, "dendrímero" deriva de "dendron", que en griego significa "árbol" y "meros"</p>	<p><b>Aplicaciones:</b> Las principales aplicaciones y usos potenciales de los dendrímeros son: revestimiento, agente activador de superficies, catalizadores, modificador de viscosidad, sensor al responder a estímulos (disolventes químicos y luz), termoplástico, nuevos materiales eléctricos, aplicación en medicina farmacia, <b>agente descontaminante. En medicina:</b> Diagnósticos <i>in vitro</i>, transporte de fármacos y terapia génica.</p>

	<p>tierra, un lugar del centro de Michigan situado cerca del río Chippewa, no era buena para los cultivos pero sí para los árboles. Año tras año, veía como nuevas semillas de los árboles germinaban y de ellas salía inicialmente una única vara flexible de la que iban surgiendo ramas y más ramas hasta formar frondosos ejemplares que se disputaban el espacio en el tupido bosque. Un día, se le ocurrió analizar aquellas criaturas con sus ojos de químico. Cuenta Tomalia, que su estructura ramificada le hizo soñar con la posibilidad de diseñar una molécula química capaz de crecer de forma controlada uniéndose a otras hasta formar una estructura arborescente cada vez más compleja. Con los años, aquella idea fue germinando en la mente del científico hasta que, a finales de los 70, dio luz al primer dendrímero.</p> <p>Lo que hace de los dendrímeros unas moléculas valiosas es que los extremos de las ramificaciones que forman la periferia pueden ser modificados a voluntad uniéndole otras moléculas. De esa manera se consigue dotarlas de propiedades interesantes, como la emisión de luz al ser excitadas (fotoluminiscencia), o las convierten en ideales portadores de fármacos o genes. Entre las propiedades más sobresalientes de algunos dendrímeros está la habilidad para atravesar las membranas de las células, algo que, junto a su capacidad para transportar otras moléculas, las convierte en vectores ideales para la introducción de fármacos y genes en el interior celular. Unos de estos dendrímeros (TRANSGEDEN) ha sido desarrollado en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la UCLM.</p>		significa "parte".	También tienen <b>aplicaciones en óptica</b> : como medios de almacenamiento de información, recubrimiento de fibras ópticas.
--	---	--	--------------------	---

Fuente: compilación realizada por autora

## Anexo 2 Molecular Workbrech

Todos estos los módulos son como una sola pieza integrada tras una simple interfaz de usuario. La parte navegadora sirve de un sistema repartidor que sube materiales (creado utilizando MW) en Internet o en el disco duro. Su relativa simplicidad ayuda a que los productos finales, que son actividades interactivas, basadas en simulaciones, serán fáciles de operar por principiantes.

El sistema de MW es capaz de soportar cualquier tipo de simulación a través de un mecanismo de plug-in, además de las simulaciones moleculares de dinámica bi y tridimensional incorporada. El hecho que un plug-in puede ser una Java Applet lo hace capaz de incluir muchos tipos de simulaciones.

### TRABAJANDO CON PÁGINAS

Navegar páginas MW es similar a navegar por páginas HTML con cualquier navegador estándar de Internet:

Dé un clic sobre cualquier texto hiper-vinculado para lanzarse a otra página, así como en cualquier navegador. Por defecto, el texto hiper-vinculado da la apariencia de estar azul y subrayado antes de dar un clic. La página a la que señala un hiper-vinculo puede estar en su computadora o en la Internet.

**NOTA IMPORTANTE:** Si el MW está en modo autor, dar un clic sobre un hiperenlace no tendrá efecto. Los hiperenlaces funcionan sólo cuando el MW está en modo vista. Si a usted tuviera que probar un hiperenlace mientras en modo autor, guarde la página actual, salga del modo editor, y dé un clic sobre el hiperenlace.

Escriba, o copie y pegue, una dirección en el Campo de Dirección y el oprima la tecla ENTER. El Campo de Dirección también conserva direcciones recientes que pueden encontrarse en su lista desplegable asociada.

Dé un clic sobre el Botón Back en la barra de herramientas para regresar una página (la ruta del menú: "View >Go To > Back"). Usted puede llegar hasta la página de inicio. Usted también puede presionar "ALT+Left" (en Windows y Linux) o el comando "+" (en Mac OS X) tecla **1** para regresar. Si la página previa es más larga que la altura de la ventana, la barra de desplazamiento será automáticamente traída a la posición a la que usted lleo cuando dejó la página.

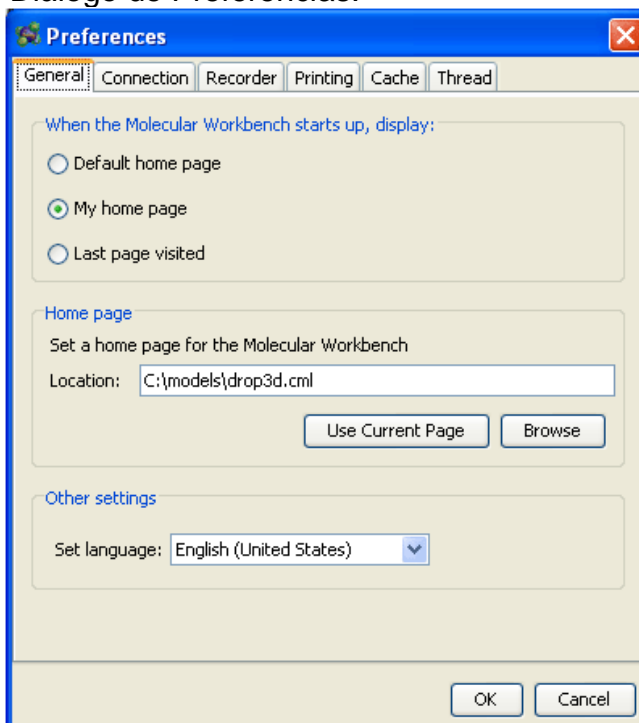
Dé un clic sobre el Botón Forward en la barra de herramientas para avanzar en la página ( "View>Go To>Forward"). Este botón está deshabilitado si la página actual es la última. Usted también puede

presionar "ALT+Right" (en Windows y Linux) o Le Puede Ordenar con "+" (en Mac OS X). Si la página es más larga que la altura de la ventana, la barra de desplazamiento será automáticamente traída a la posición a la que usted enrolló cuando usted dejó la página.

El clic en el Botón Reload en la barra de herramientas para volver a cargar la página ("View>Reload "). Usted también puede presionar a F5/Ctrl +R (en Windows y Linux) o Command +R (en Mac OS X) para volver a cargar. Volver a cargar la página puede usarse para poner a cero todas las simulaciones, sus controles y sus producciones en la página de inmediato.

Dé un clic sobre el Botón de la Página Principal del Sitio Web en la barra de herramientas para ir a la página principal del sitio Web. La página principal por default es la Página Principal del Sitio Web Molecular WORKBENCH. La página principal del sitio Web también puede estar colocada para ser la página para inicio que será exhibida después de que MW se lanza. Para colocar la página principal del sitio Web y la página de inicio, escoja menú "Option>Preferences" (en Windows y Linux), o "Molecular Workbench>Preferences..." (en Mac OS X).

Usted vera el Diálogo de Preferencias:



Cuando el MW está en el modo editorial, todos los menús y los botones para navegar serán puestos gris o estarán escondidos. Para restaurar las funcionalidades de navegación, guarde la página en la que usted está trabajando y deje el modo editorial.

Scripting (para usuarios avanzados):

Para hacer que MW abra una página, use los siguientes scripts:

1. Abrir filename.cml en un server remoto:

```
script:page:0:load http://www.domain.edu/path/filename.cml;
```

2. Abrir filename.cml en el directorio actual:

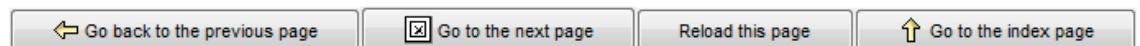
```
script:page:0:load filename.cml;
```

el prefijo en el script "script:page:0:" se necesita para indicar al Script Dispatcher que este es un script para la página MW actual. Vea el protocolo de script para más información. En la mayoría de los casos, usted no necesita usar el comando de cargar para navegar una página. En cambio, solo debe usar un simple hiperenlace.

La orden Load debiera ser usada en casos cuando la hiper-conexión no es posible, como acciones lanzadas desde botones, o cuándo a usted le gustaría que el enlace haga más que simplemente conmutación para otra página. Un ejemplo del caso reciente es que usted puede combinar otras órdenes con la orden Load, como escrito:script:page:0:message <t>Pasaremos a la siguiente página.</t>; load download.cml , que mostrará una ventana emergente con el mensaje antes de abrir la nueva página

Los scripts equivalentes para los botones Back, Forward, Home and Reload son como sigue:

```
script:page:0:back;
script:page:0:forward;
script:page:0:home;
script:page:0:reload;
```



Estos scripts pueden estar listos dentro de un botón de actividad para crear sus propios botones de navegación en cualquier parte en la página, como se demuestra abajo:

Los botones lanzando scripts como los anteriormente citados pueden usarse para proveer el soporte de navegación para las páginas que van

a ser abiertas en una nueva ventana sin una barra de navegación, en cuyo caso el usuario no tendrá acceso los botones Back, Forward and Reload.

### **Guardando una pagina**

Antes de que usted guarde una página de MW, sugerimos que una carpeta sea creada en su computadora para almacenar los archivos guardados. Usted también puede querer guardar actividades diferentes en subcarpetas diferentes (a veces conviene considerar tales carpetas como carpetas de proyecto).

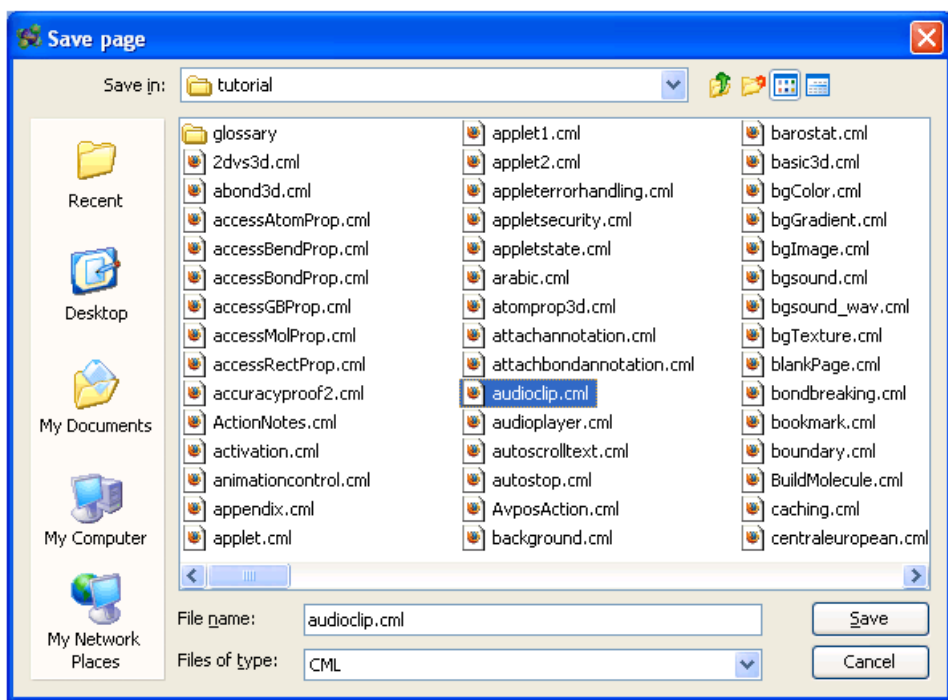
Hay tres formas para guardar una página:

- Click en el boton " Save " en la barra superior.

- Escoja en el menu "File>Save" o "File>Save As".

- Presione CTRL+S (en Windows o Linux), o Command+S (en Mac OS X).

Una ventana de diálogo se mostrara. La ventana de diálogo muestra el sistema de archivo de su computadora. Por ejemplo, la siguiente imagen muestra la ventana de diálogo del archivo en Windows XP (en Windows, Linux y Mac OS X, el diálogo del archivo se verá diferente):



Cuando el diálogo del archivo está listo, abra la carpeta usted hizo para almacenar los archivos bajados de Internet, introduzca un nombre si usted tiene el deseo de cambiar el actual nombre de archivo, y presione Save en la ventana de diálogo. Después de que usted ha hecho estos pasos, la página habrá sido bajada de Internet en la carpeta, incluyendo las fuentes de los componentes incrustados (como las imágenes). Usted no se necesita preocupar acerca de perder componentes incrustados en la página.

Una ventaja de los Sistema de MW es que usted siempre puede aguardar una página de MW con modelos incorporados de Internet a su disco local, sin perder los modelos. Un navegador convencional de Internet también le permite guardar paginas HTML, pero usted usualmente no consigue los componentes incrustados como una Java Applet o una animación Flash.

Si usted quiere a guardar varias páginas conectadas, actualmente no hay método distinto salvo guardar página por página. Es sugerido que los nombres de archivo originales de las páginas sean mantenidos. Si usted los cambia, los hiperenlaces que establecen referencias para ellos no trabajarán.

Usted también puede exportar una página en el formato de HTML.

## Guardando páginas con modelos linkeados (Autores avanzados)

Algunas páginas tienen enlaces para los modelos (a través de la orden Load) que automáticamente no quedan salvados cuando la página es aguardada. Tal enlace puede ser asociado con cualquier componente o cualquier hiperenlace en la página . El autor original de la página puede añadir los nombres de archivo de los modelos vinculados en el panel "Additional Resources File" (que puede ser abierto usando "Edit > Additional Resource Files..." ) para permitir que se guarden junto con la página y los modelos predeterminados en ella, cuando el boton "Save" en presionado.

Si el autor original olvida incluir un modelo vinculado en la lista "Additional Resource Files" , usted tiene que guardarlo manualmente. Primero, dé un clic sobre el enlace o el botón para cargar el modelo contenedor asociado. En segundo lugar, dé clic derecho en la ventana de vista del contenedor y haga clic en "Save Model As" del menú emergente. Usted tiene que asegurarse de que todos estos modelos vinculados se guardan también en sus nombres originales de archivo (sensible a las mayúsculas-minúsculas).


Para todo modelo 2D: Para conocer el nombre original de un modelo, abra el Panel de Propiedades, y busque el nombre de archivo al pie de la ventana en el primer panel tabulado. Para guardarlo, dar clic derecho en (o CTRL+click en Mac OS X sin un ratón del botón múltiple) el contenedor de modelo, y seleccionar "Save Model As" en el menú emergente.

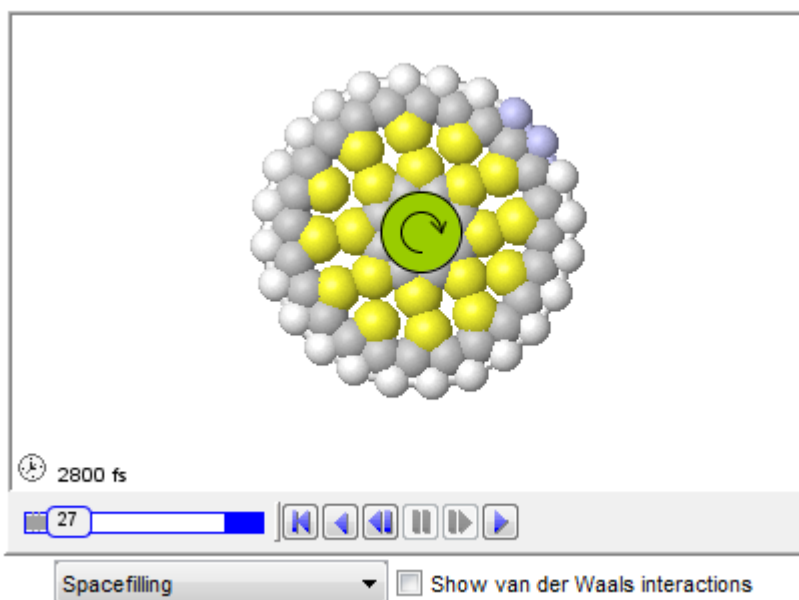
## **Nanomaquinas hipoteticas:**

### **Nano cambios internos**


Instrucción: Un piñón que exactamente corresponde a la parte de adentro de la rueda alternará en la misma velocidad con la rueda.

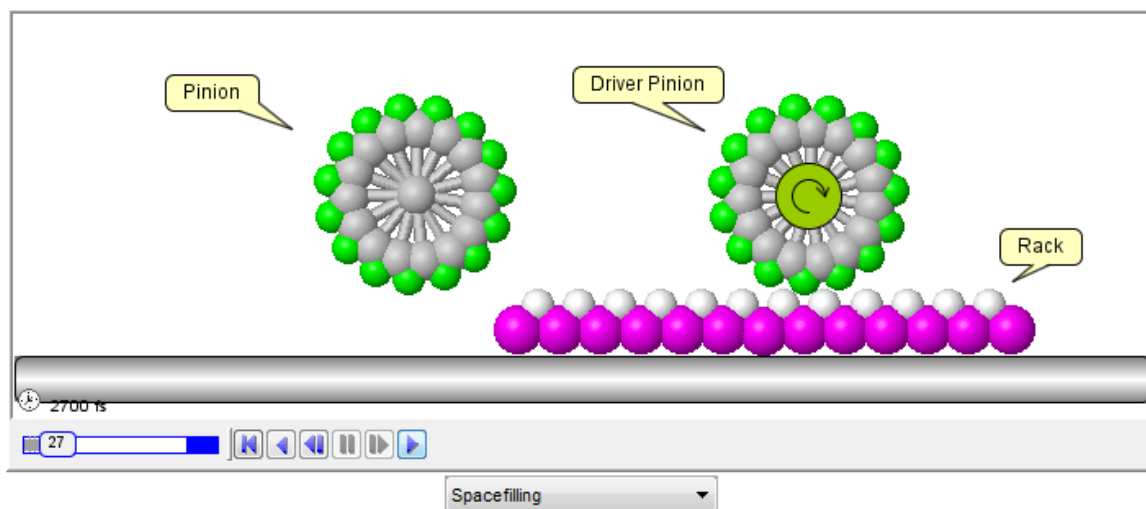


 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



## Nano cremalleras y piñones

 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



## Nano piñones planetarios

Instrucción: Los conjuntos de piñones planetarios están compuestos de tres componentes: el engranaje sol, los piñones planetarios, y el piñon anillo. Cada uno de estos componentes pueden ser de entrada, salida o fijo. La relación de engranajes, que es la proporción de la velocidad de rotación acelera de los componente de entrada y salida, es determinada por el ajuste de estos componentes y el número de dientes del piñon sol y anillo:


cuando Input=S, Output=C, Stationary=R, gear ratio =  $1 + r / s$ ;

cuando Input=S, Output=R, Stationary=C, gear ratio =  $- r / s$ ;

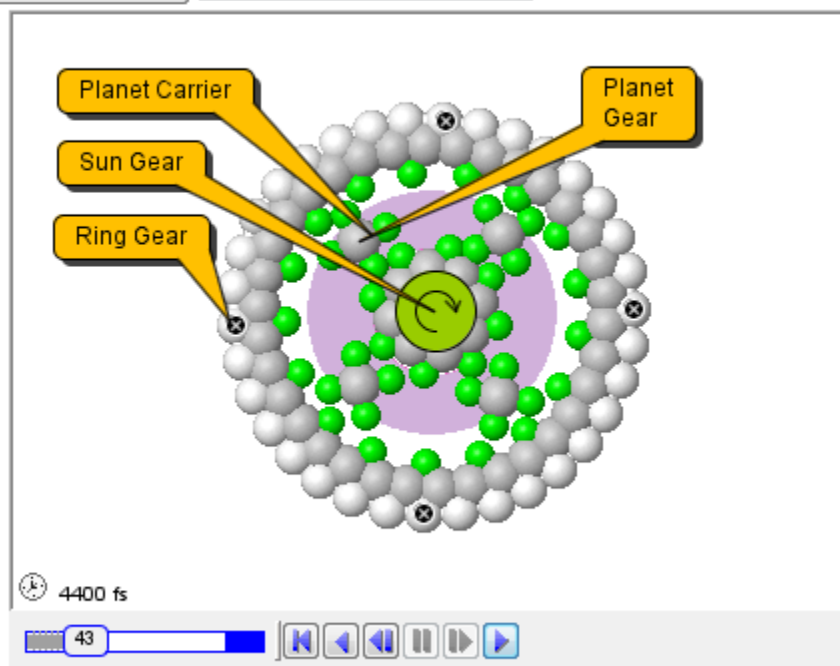
cuando Input=C, Output=R, Stationary=S, gear ratio =  $r / ( r + s )$ ;

Donde r es el número de dientes del piñón anillo y s es el número de dientes del Sol. Si la proporción es mayor que 1, es una reducción (el componente de salida gira menos que el de entrada). De otra manera, es una aceleración (el componente de salida gira más rápidamente que el de salida).

¿Son las citadas fórmulas también aplicables para engranes planetarios moleculares? Compruébelo usted mismo. Si no, ¿por qué? (¿Qué problemas encontraremos cuando apliquemos ingeniería mecánica para la nanotecnología molecular?)

 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0


Clear Annotations    Spacefilling     Show van der Waals interactions

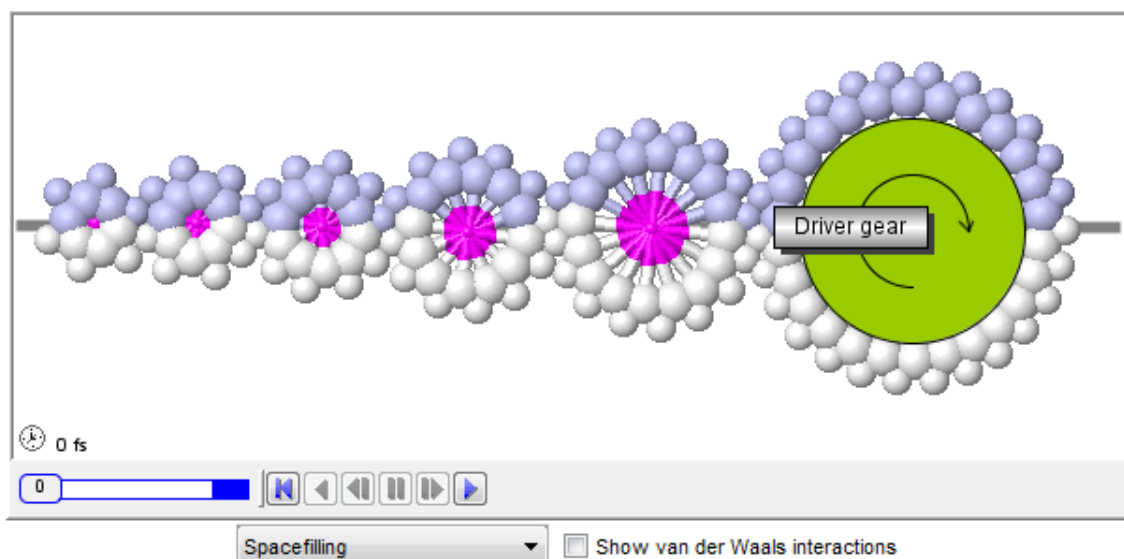


Change Gear: (S=sun gear; net carrier; R=ring gear;)

Input: S, Output: C, Stationary: R     Input: S, Output: R, Stationary: C     Input: C, Output: R, Stationary: S

**Una maquina hipotética para operar a nanoescala**


 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0

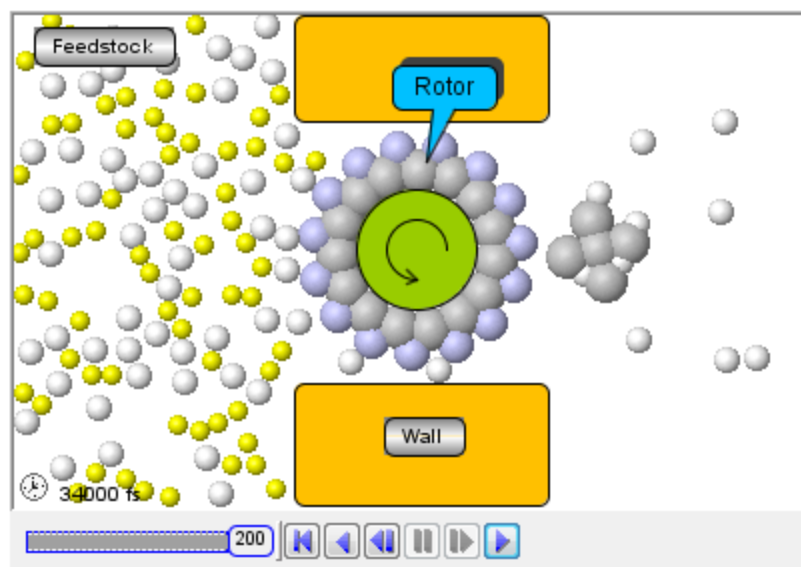


### Seleccionador molecular

Instrucción: Los clasificadores moleculares son nanomaquinas hipotéticas que separan ciertos tipos de moléculas de una solución. Los clasificadores moleculares podrían ser utilizados como un método altamente eficiente de purificación. En el citado modelo, las moléculas blancas se aglutinan fuertemente para las receptoras (representadas por las partículas azules) al borde de un rotor conducido por un motor rotativo (representado por el círculo verde oscuro). Las moléculas púrpuras no se aglutinan con los receptores. Una receptor más fuerte es colocado a la derecha del rotor de clasificación para sacar moléculas atascadas a las receptoras del rotor. La simulación muestra un transporte altamente selectivo de moléculas a través del clasificador.


Usted puede notar que algunas partículas amarillas pueden llegar al final. Un set secuencial de clasificadores puede usarse para lograr una purificación más alta.

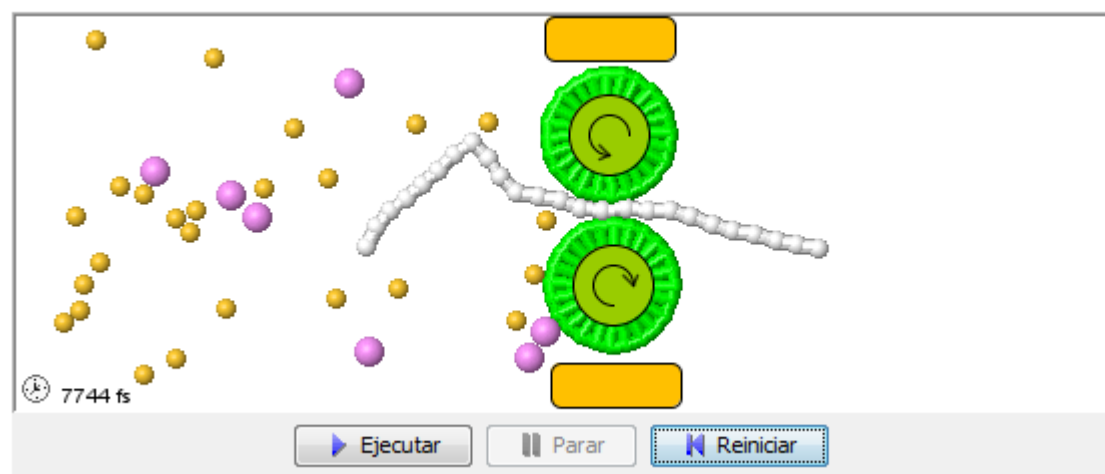
 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



Los dispositivos de purificación como este clasificador molecular teórico son críticamente importantes en la nanotecnología futura, porque el proceso de confeccionar nano máquinas a nivel molecular en gran medida depende de que los componentes puros (o sea los participantes de reacciones químicas) de reactivo puedan ser obtenidos exactamente.


### Una máquina molecular para transportar polímeros a través de una membrana

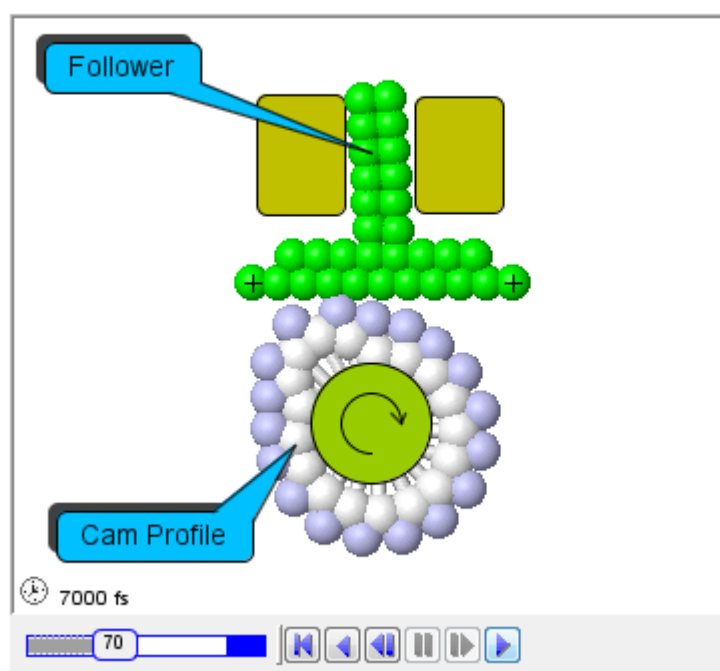
 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



## Una nano-leva

En ingeniería mecánica, una leva es un mecanismo para convertir el movimiento de rotación de una rueda en el movimiento lineal recíproco de una barra (llamada el seguidor). La rueda es usualmente llamada perfil de la leva. Tiene una forma que no es perfectamente redonda, que determina el movimiento del seguidor. ¿Podemos construir una leva que trabaja a nivel molecular?

 A Race Car Made of Nanotubes: Bigger than the Smallest - Molecular Workbench V3.0



## Anexo 3 Software Visual Molecular Dynamics VMD

Es imposible cubrir todas las capacidades de VMD en una unidad; por lo cual se presentará varios ejemplos paso a paso de las características básicas de VMD. Los temas cubiertos en este documento incluyen la visualización de moléculas en tres dimensiones con diferentes métodos de dibujo y coloración, renderización de figuras con calidad de publicación, animación y análisis de la trayectoria de una simulación de dinámica molecular, scripting en la interfaz basada en texto Tcl / Tk y análisis de secuencias y estructura de datos para proteínas.

### TRABAJO CON UNA ÚNICA MOLÉCULA

En esta sección se introducirán las funciones básicas de VMD, comenzando por cargar una molécula, mostrar la molécula y renderizado de imágenes de moléculas con calidad de publicación. Esta sección utiliza la proteína ubiquitina como molécula de ejemplo. La ubiquitina es una proteína pequeña responsable de etiquetar las proteínas para la degradación, y se encuentra en todos los eucariotas con secuencias y estructuras casi idénticas.

#### Recursos Necesarios

- Hardware: Computadora
- Software: VMD y un programa de visualización de imágenes
- Archivos: 1ubq.pdb, que se puede descargar

### PROTOCOLO BÁSICO 1

#### Carga y visualización de la molécula

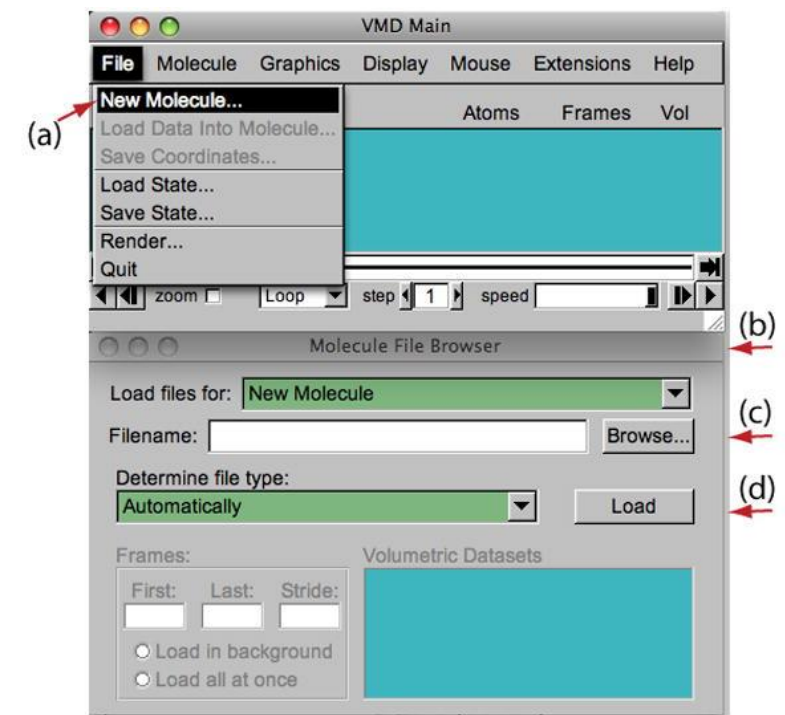
Una sesión VMD por lo general comienza con la carga de información estructural de una molécula en VMD. Cuando VMD carga una molécula, accede a la información sobre los nombres y coordenadas de los átomos. Entonces, uno puede explorar varias características de la visualización de VMD para conseguir una visión agradable de la molécula cargada.

#### Cargando una molécula

El primer paso es cargar la molécula. Se cargará el archivo pdb, **1ubq.pdb** (Vijay-Kumar et al., 1987) que contiene las coordenadas atómicas de la ubiquitina.

1. Inicie una sesión VMD. En la ventana principal de VMD, elija File → New Molecule... (Figura 2 (a)). La ventana Molecule File Browser (Figura 2 (b)) aparecerá en la pantalla.

Figura 2

Figura 2  
Cargando una molécula.

2. Utilice el botón Browse... (Figura 2 (c)) para buscar el archivo 1ubq.pdb. Cuando se selecciona el archivo, volverá a aparecer en la ventana Molecule File Browser. Para cargar realmente el archivo, presione Load (Figura 2

(d)).

3. Ahora, la ubiquitina se muestra en la ventana de visualización de OpenGL. Cierre la ventana Molecule File Browser en cualquier momento.

*VMD puede descargar un archivo pdb desde Protein Data Bank (<http://www.pdb.org>) si hay una conexión de red disponible. Simplemente escriba el código de cuatro letras de la proteína en la entrada de texto Nombre de archivo de la ventana Molecule File Browser y presione el botón Load. VMD lo descargará automáticamente.*

#### Muestra la molécula

Con el fin de ver la estructura 3D de nuestra proteína, el ratón se utilizará en múltiples modos para cambiar el punto de vista. VMD permite a los usuarios girar, escalar y traducir el punto de vista de la molécula.

4. En la pantalla OpenGL, presione el botón izquierdo del ratón y mueva el ratón. Explora lo que sucede. Este es el modo de rotación del ratón y permite la rotación de la molécula alrededor de un eje paralelo a la pantalla (Figura 3 (a)).

figura 3



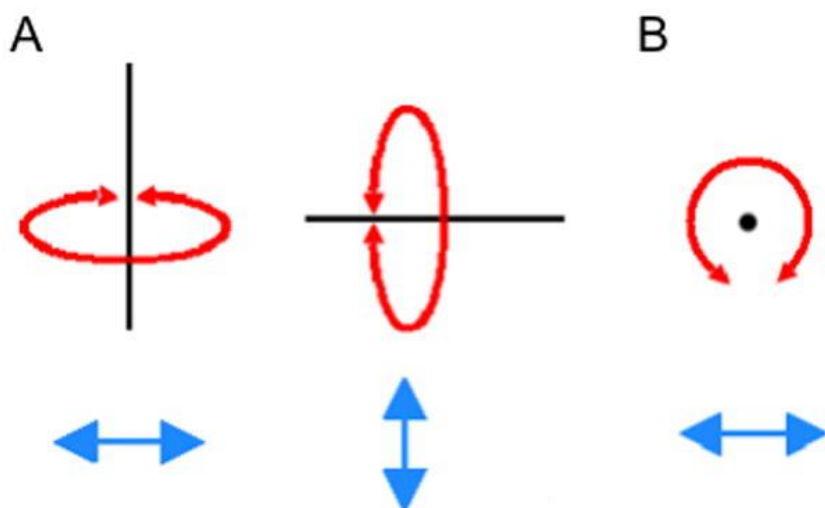


figura 3  
Modos de rotación. (A) Ejes de rotación al mantener pulsada la tecla izquierda del ratón. (B) Los ejes de rotación al mantener pulsada la tecla derecha del ratón.

5. Manteniendo pulsado el botón

derecho del ratón y repitiendo el paso anterior, se producirá una rotación alrededor de un eje perpendicular a la pantalla (Figura 3 (b)).

*Para los usuarios de Mac que tienen un ratón de un solo botón o un trackpad, el botón derecho del ratón equivale a mantener pulsada la tecla de comando mientras pulsa el botón del ratón / trackpad).*

6. En la ventana principal de VMD, mire el menú Mouse (Figura 4). Aquí, el usuario puede cambiar el modo del ratón de los modos Rotación a Traslación o Escala.

Figura 4

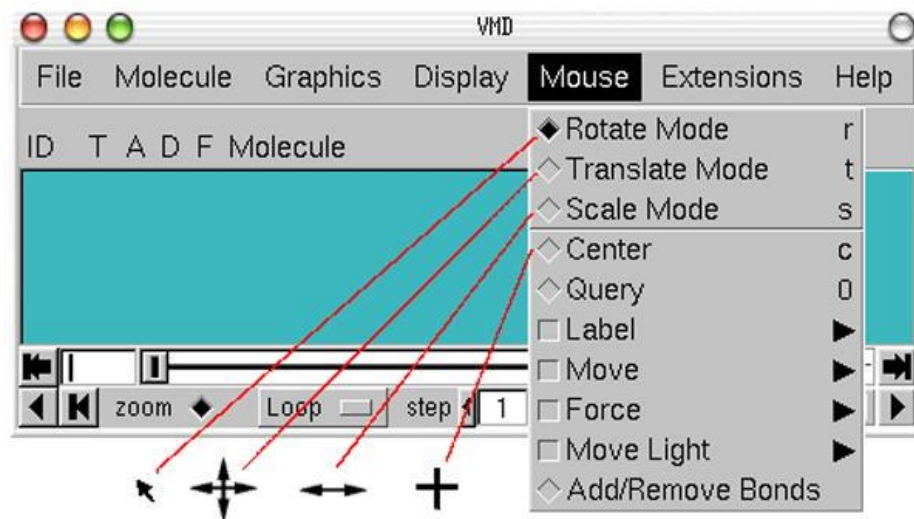


Figura 4  
Los modos del ratón y sus cursores

característicos.

7. Seleccione el modo de traslación y vuelva a la pantalla de OpenGL. Ahora es posible mover la molécula alrededor cuando mantenga presionado el botón izquierdo del ratón.

8. Vuelva al menú Mouse y elija el modo Escala esta vez. Esto permitirá al usuario acercar o alejar moviendo el ratón horizontalmente mientras mantiene pulsado el botón izquierdo del ratón.

*Cabe señalar que estas acciones realizadas con el ratón sólo cambian el punto de vista y no cambian las coordenadas reales de los átomos de la molécula.*

*Observe también que cada modo de ratón tiene su propio cursor característico y su propia tecla de acceso directo (r: Rotate, t: Translate, s: Scale). Cuando la ventana de visualización de OpenGL es la ventana activa, estas teclas de método abreviado se pueden utilizar en lugar del menú del ratón para cambiar el modo del ratón.*

*Otra opción útil es el elemento de menú Mouse → Center. Le permite especificar el punto alrededor del cual se realizan las rotaciones.*

9. Seleccione el elemento de menú Center elija un átomo en uno de los extremos de la proteína; El cursor debe mostrar una cruz.

10. Ahora, presione r, y gire la molécula con el ratón y vea cómo la molécula se mueve alrededor del punto seleccionado.

11. En la ventana principal de VMD, seleccione el elemento de menú Display → Reset View para volver a la vista predeterminada. También puede restablecer la vista pulsando la tecla "=" cuando esté en la ventana de visualización de OpenGL.

### Graphical Representations

VMD puede mostrar las moléculas de varias maneras al establecer la ventana Graphical Representations mostrada en la Figura 5. Cada representación está definida por cuatro parámetros principales: la selección de átomos incluidos en la representación, el estilo de dibujo, el método de coloración y el material. La selección determina qué parte de la molécula se dibuja, el método de dibujo define qué representación gráfica se utiliza, el método de coloración da el color de cada parte de la representación y el material determina los efectos de iluminación, sombreado y transparencia sobre la representación. Primero exploremos diferentes estilos de dibujo.

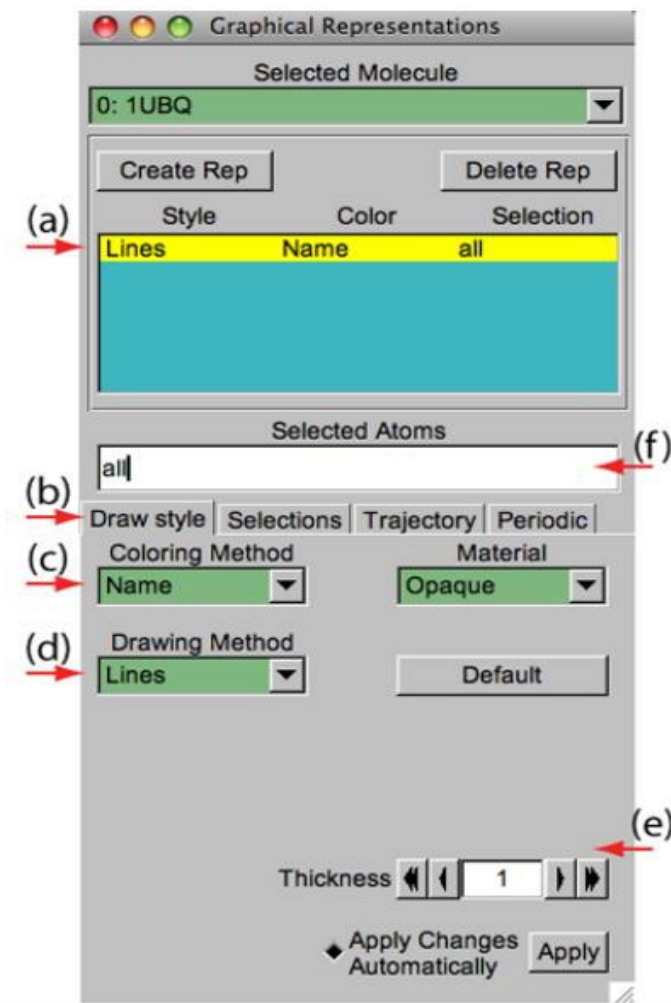


Figura 5  
La ventana Graphical Representations.

Exploración de diferentes estilos de dibujo

12. En la ventana principal de VMD, elija el elemento de menú Graphics → Representations... Aparecerá una ventana denominada Graphical Representations y la representación actual por defecto se resaltará en amarillo (Figura 5a).

13. En la pestaña Draw Style (Figura 5 (b)) cambie style

(Figura 5 (d)) y color (Figura 5 (c)) de la representación. Aquí nos centraremos en el estilo de dibujo (el valor predeterminado es Lines).

14. Cada método de dibujo tiene sus propios parámetros. Por ejemplo, cambie el Espesor de las líneas usando los controles en la esquina inferior derecha (Figura 5 (e)) de la ventana Graphical Representations.

15. Haga clic en Drawing Method (Figura 5 (d)), para ver una lista de opciones. Elija VDW (van der Waals); Cada átomo ahora está representado por una esfera escalada a su radio vander Waals, permitiendo que el usuario vea la distribución volumétrica de la proteína.

16. Al elegir VDW como método de dibujo, aparecerán dos nuevos controles en la esquina inferior derecha (Figura 5 (e)). Utilice estos controles para cambiar la Escala de Esfera a 0.5 y la Resolución de Esfera a 13. Tenga en cuenta que cuanto mayor sea la resolución, más lenta será la visualización de la molécula.

17. Pulse el botón Default. Esto devuelve a las propiedades predeterminadas del método de dibujo elegido.

Otras representaciones populares incluyen CPK y Licorice. En CPK, como en los viejos kits de bola y palo de química, cada átomo está representado por una esfera y cada enlace está representado por un cilindro fino (el radio y la resolución de la esfera y del cilindro pueden ser modificados). El método de dibujo Licorice también representa cada átomo como una esfera y cada enlace como un cilindro, pero la esfera y el cilindro tienen los mismos radios.

Las representaciones anteriores visualizan los detalles micromoleculares de la proteína mostrando cada átomo. Las propiedades estructurales más generales pueden demostrarse mejor utilizando métodos de dibujo más abstractos.

18. Elija el estilo Tubo en Método de dibujo, que muestra la columna vertebral de la proteína. Establezca el radio en 0.8. El resultado debe ser similar al de la Figura 6.

Figura 6

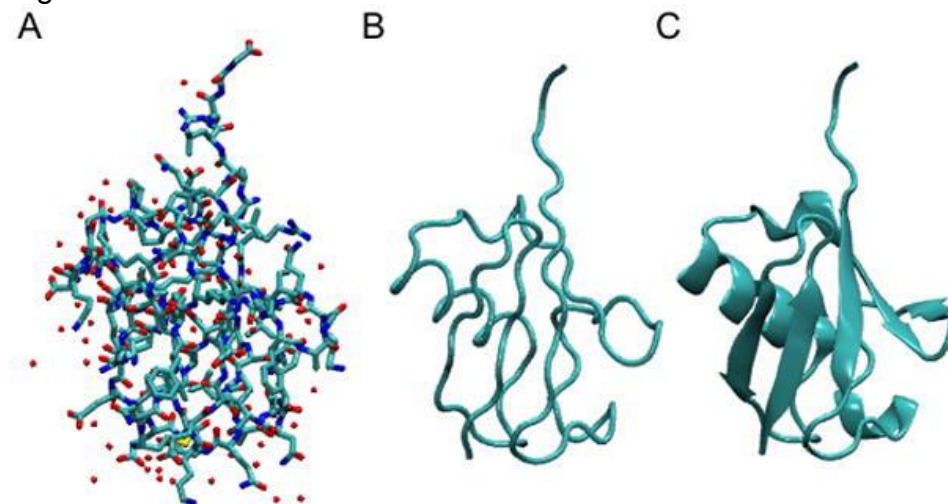


Figura 6

(A) Licorize, (B) Tubo, y (C) NewCartoon, representaciones de ubiquitina.

El último método de dibujo descrito aquí es NewCartoon. Proporciona una representación simplificada de una proteína basada en su estructura secundaria. Las hélices se dibujan como cintas en espiral, láminas- $\beta$  como flechas sólidas y planas y todas las otras estructuras como un tubo. Este es probablemente el método de dibujo más popular para ver la arquitectura general de una proteína.

19. En la ventana Graphical Representations, elija Drawing Method  $\rightarrow$  NewCartoon. Las hélices, las hojas  $\beta$  y las bobinas de la proteína pueden ahora ser fácilmente identificables.

La ubiquitina tiene tres y media vueltas de  $\alpha$ -hélice (residuos 23 a 34, tres de ellos hidrófobos), una pequeña pieza de  $3_{10}$ -hélices (residuos 56 a 59) y una hoja  $\beta$  mixta con cinco hilos (residuos 1 a 7 , 10 a 17, 40 a 45, 48 a 50 y 64 a 72) y siete vueltas inversas. VMD utiliza el programa STRIDE (Frishman y Argos, 1995) para calcular la estructura secundaria de acuerdo con un algoritmo heurístico.

### **Exploración de diferentes métodos de coloración**

En esta serie de pasos, se exploran diferentes representaciones de métodos de coloración.

20. En la ventana Graphical Representations, el método de coloración predeterminado es Coloring Method  $\rightarrow$  Name. En este método de coloración, elija un método de dibujo que muestre átomos individuales: cada átomo tendrá un color diferente, es decir: O es rojo, N es azul, C es cian y S es amarillo.

21. Seleccione Coloring Method  $\rightarrow$  ResType (Figura 5 (c)). Esto permite distinguir los residuos no polares (blancos) de los residuos básicos (azul), residuos ácidos (rojo) y residuos polares (verde).

22. Seleccione Coloring Method  $\rightarrow$  Structure (Figura 5 (c)) y confirme que la representación NewCartoon muestra colores consistentes con la estructura secundaria.

### **Visualización de diferentes selecciones**

Para mostrar sólo partes de la molécula de interés, se puede especificar su selección en la ventana Graphical Representations (Figura 5 (f)).

23. En la ventana Graphical Representations, hay una entrada de texto Átomos seleccionados (Figura 5 (f)). Elimine la palabra todo, escriba hélice y presione el botón Aplicar o presione la tecla Intro / regresar (recuerde hacer esto cada vez que cambie una selección). VMD mostrará sólo las hélices presentes en la molécula.

24. En la ventana Graphical Representations, seleccione la pestaña Selections (Figura 7 (a)). En la sección Singlewords (Figura 7 (b)), se proporciona una lista de posibles selecciones que se pueden introducir.

Figura 7

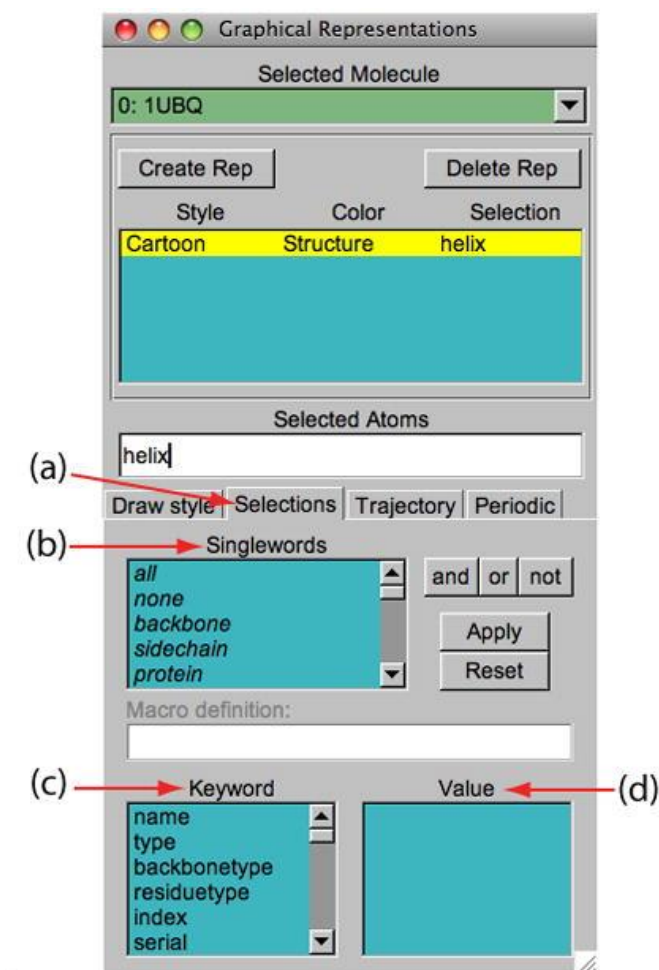


Figura 7  
Graphical Representations y la pestaña Selections.

*También se pueden usar combinaciones de operadores booleanos al escribir una selección.*

25. Para ver la molécula sin hélices y hojas  $\beta$ , escriba lo siguiente en Selected Atoms: (no helix) y (not betasheet). Recuerde presionar el botón Apply o presione la tecla Enter / Return

para aplicar.

26. En la sección Keyword (Figura 7 (c)) de la pestaña Selections, se enumeran las propiedades que se pueden utilizar para seleccionar partes de una molécula junto con sus posibles valores. Mire los posibles valores de la palabra clave "resname" (Figura 7 (d)).

27. Muestre todas las lisinas y glicinas presentes en la proteína escribiendo (resname LYS) o (resname GLY) en los átomos seleccionados.

*Las lisinas juegan un papel fundamental en la configuración de las cadenas de poliubiquitina.*

28. Cambie el Drawing Method de la representación actual a CPK y el Método de Coloreado a ResName en la pestaña Draw Style. En la pantalla, las diferentes lisinas y glicinas serán visibles.

29. En la entrada de texto Selected Atoms, escriba water. Seleccione Coloring Method  $\rightarrow$  Name. Las 58 moléculas de agua presentes en el sistema muestran ahora (de hecho sólo sus átomos de oxígeno).

30. Para ver qué moléculas de agua están más cerca de la proteína, use el comando within. Escriba water y within 3 de la proteína en Selected Atoms. Esto

selecciona todas las moléculas de agua que están a una distancia de 3 Å de la proteína.

31. Por último, trate de escribir en Selected Atoms las selecciones mostradas en la primera columna de la Tabla 1. Cada una de estas selecciones mostrará la proteína o parte de la proteína tal como se expuso en la segunda columna de la Tabla 1.

<b>Seleccion</b>	<b>Accion</b>
Protein	Muestra la proteina
resid 1	El primer residuo
(resid 1 76) and (not water)	El primer y ultimo residuo
(resid 23 to 34) and (protein)	La hélice $\alpha$

Tabla 1 Ejemplos de selecciones de átomos.

#### Creación de representaciones múltiples

El botón Create Rep (Figura 8 (a)) en la ventana Graphical Representations permite la creación de múltiples representaciones. Por lo tanto, los usuarios pueden tener una mezcla de diferentes selecciones con diferentes estilos y colores, todos mostrados al mismo tiempo.

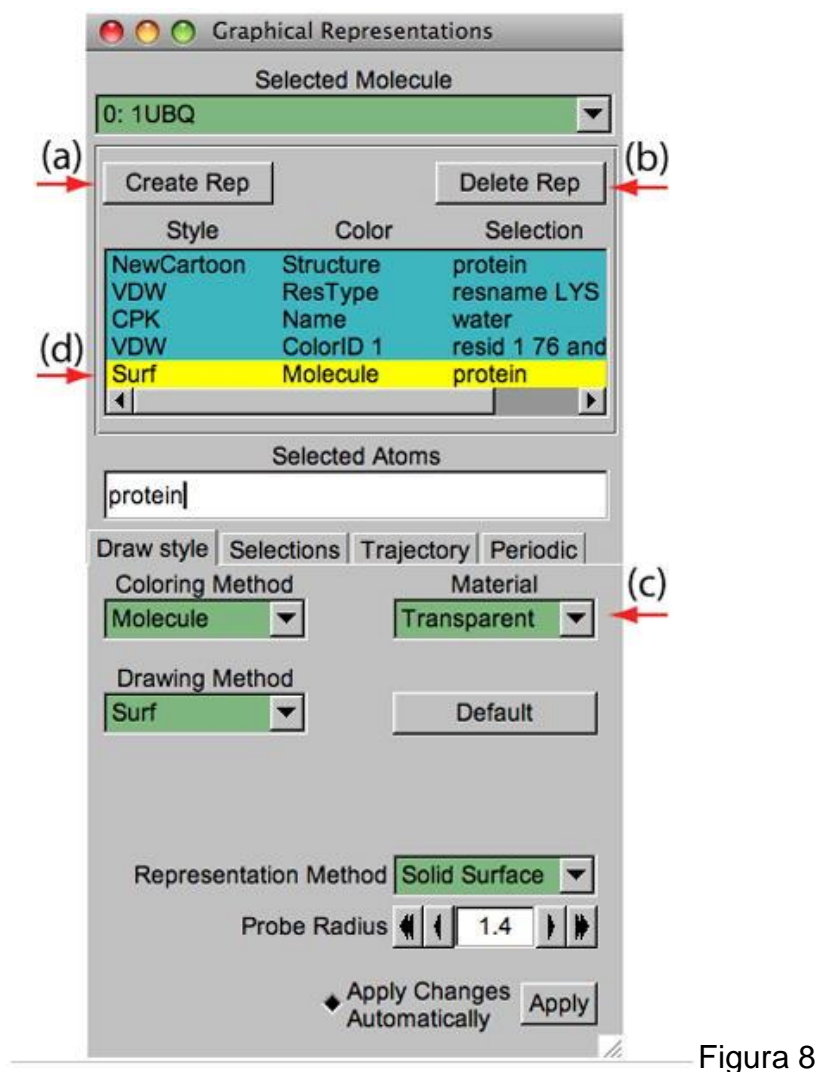


Figura 8

Figura 8  
Representaciones Múltiples de ubiquitina.

32. Para la representación actual, en Selected Atoms escriba protein, establezca el Drawing Method en NewCartoon y Coloring Method en Structure.
33. Presione el botón Create Rep (Figura 8 (a)). Se creará una nueva representación.
34. Modifique la nueva representación para Drawing Method - VDW, ResType como Método de Coloreado y resname LYS como la selección actual.
35. Repitiendo el procedimiento anterior, crear las dos nuevas representaciones siguientes en la Tabla 2. Estas dos representaciones muestran las moléculas de agua y los átomos C $\alpha$  del primer y último residuo de la proteína.

Tabla 2



Ejemplos de representaciones.

Selección	Coloring Method	Drawing Method
Water	Name	CPK
resid 1 76 and name CA	ColorID → 1	VDW

Tabla 2 Ejemplos de representaciones.

36. Cree la última representación pulsando nuevamente el botón Create Rep . Drawing Method → Surf para el método de dibujo, Coloring Method → Molecule para el método de coloración y escriba proteína en la entrada Selected Atoms. Para esta última representación, seleccione Transparent en el menú desplegable Material (Figura 8 (c)). Esta representación muestra la superficie volumétrica de la proteína en transparente.

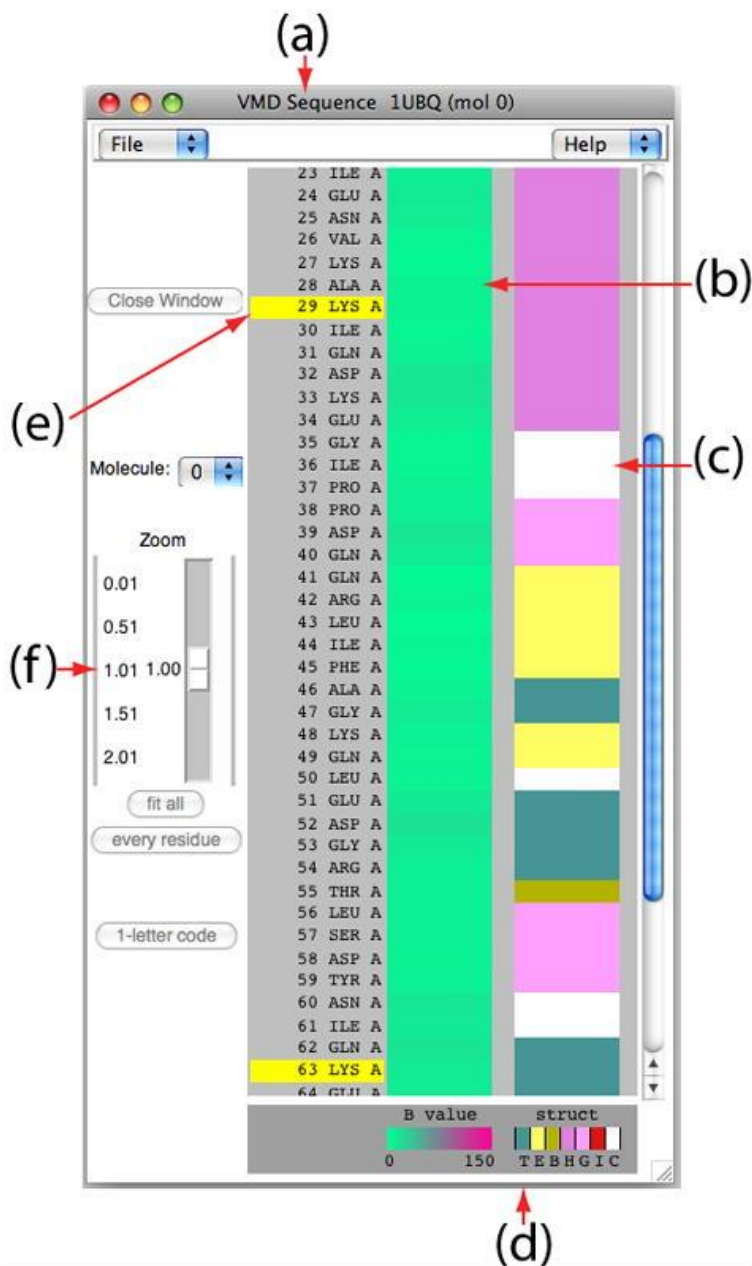
*Tenga en cuenta que puede seleccionar y modificar las diferentes representaciones que ha creado haciendo clic en una representación para resaltarla en amarillo. También, cada representación se puede encender / apagar haciendo doble clic en él. Para eliminar una representación, resáltela y luego haga clic en el botón Delete rep. (Figura 8 (b)). Al final de esta sección, la ventana Graphical Representations debe ser similar a la Figura 8.*

#### Extensión del visor de secuencias

Cuando se trata una proteína por primera vez, es muy útil poder encontrar y mostrar diferentes aminoácidos rápidamente. La extensión del visor de secuencias permite ver la secuencia de proteínas, así como seleccionar y mostrar fácilmente uno o más residuos de interés.

37. En la ventana principal de VMD, elija el elemento de menú Extension → Analysis → Sequence Viewer. En la pantalla aparecerá una ventana (Figura 9 (a)) con una lista de los aminoácidos (Figura 9 (e)) y sus propiedades (Figuras 9 (b) y (c)).

Figura 9

Figura 9  
Ventana de Secuencia  
VMD.

38. Con el ratón, intente hacer clic en diferentes residuos en la lista (Figura 9 (e)) y vea cómo se resaltan. Además, el residuo resaltado aparecerá en la ventana de visualización de OpenGL en amarillo y se renderizará en el método de dibujo bond drawing, por lo que su ubicación dentro de la proteína se puede visualizar fácilmente.

39. Utilice los controles de Zoom (Figura 9 (f)) para visualizar la lista

completa de residuos en la ventana. Esto es particularmente útil para proteínas más grandes.

40. Elija múltiples residuos sosteniendo la tecla shift y haciendo clic en el botón Mouse (Figura 9 (e)).

41. Observe la ventana Graphical Representations. Debe mostrarse una nueva representación con los residuos que se han seleccionado utilizando la Extensión del Visor de Secuencias. Modificar, ocultar o eliminar esta representación es similar a los pasos descritos anteriormente.

La información sobre los residuos está codificada por colores (Figura 9 (d)) en columnas y obtenida de STRIDE. La columna "B-value" (Figura 9 (b)) muestra el campo B-value (factor de temperatura) que a menudo se proporciona en los archivos pdb. La columna struct muestra la estructura secundaria (Figura 9 (d)), donde cada letra corresponde a una estructura secundaria, que aparece en la Tabla 3.

Codigos Estructura secundaria usados por STRIDE.

<b>Letra Codigo</b>	<b>Estructura secundaria</b>
T	Turn
E	Extended conformation ( $\beta$ -sheets)
B	Isolated bridge
H	Alpha helix
G	3–10 helix
I	Pi helix
C	Coil

Tabla 3  
Secundaria Estructura códigos utilizados por STRIDE.

### Guardando su trabajo

Los puntos de vista y representaciones creados con VMD se pueden guardar como un estado VMD. Este estado VMD contiene toda la información necesaria para reproducir la misma sesión VMD.

42. Vaya a la ventana OpenGL Display, use el ratón para encontrar una buena vista de la proteína. Guardaremos este punto de vista utilizando el VMM ViewMaster.

43. En la ventana principal de VMD, seleccione Extension → Visualization → ViewMaster. Esto abrirá la ventana de VMM ViewMaster.

44. En la ventana de VMD ViewMaster, haga clic en el botón Create New. El punto de vista OpenGL Display ahora se ha guardado.

45. Vaya de nuevo a la ventana de visualización de OpenGL y utilice el ratón para encontrar otra visión agradable. Si lo desea, agregue / borre / modifique una representación en la ventana Graphical Representations. Cuando se haya encontrado una buena vista, guárdela regresando a la ventana de ViewMaster de VMD y haciendo clic en el botón Create New .

46. Cree tantas vistas como desee repitiendo el paso anterior. Todos los puntos de vista se muestran como miniaturas en la ventana de VMD ViewMaster. Se puede abrir un punto de vista previamente guardado haciendo clic en su miniatura.

47. Para guardar toda la sesión VMD, en la ventana principal de VMD, elija el elemento de menú File → Save State. Escriba un nombre apropiado (por ejemplo, myfirststate.vmd) y guárdelo.

*El archivo de estado VMD myfirststate.vmd contiene toda la información necesaria para restaurar una sesión VMD, incluyendo los puntos de vista y las representaciones.*

*Para cargar un estado de VMD guardado, inicie una nueva sesión de VMD y, en la ventana principal de VMD, seleccione File → Load State.*

48. Salir de VMD.

Los fundamentos de la representación de figuras de VMD

Una de las muchas fortalezas de VMD es su capacidad para producir imágenes de alta resolución y calidad de publicación. En esta sección introduciremos algunos conceptos básicos de representación de figuras en VMD.

### Configuración del fondo de la pantalla

Antes de representar una figura, asegúrese de que el fondo OpenGL Display esté configurado de la manera que desee. Casi todos los aspectos de la pantalla OpenGL son ajustables por el usuario, incluyendo el color de fondo.

1. Inicie una nueva sesión VMD (Basic Protocol 1) y cargue el archivo 1ubq.pdb.

2. En la ventana principal de VMD, seleccione Gráficos → Colores .... Debe aparecer la ventana Controles de color. Mire a través de la lista de categorías. Todos los colores de la pantalla, por ejemplo, los colores de diferentes átomos cuando se colorean por nombre, se establecen aquí.

3. En Categorías, seleccione Mostrar. En Nombres, seleccione Fondo. Finalmente, elija "8 blanco" en Colores. La pantalla OpenGL ahora debe tener un fondo blanco.

4. Al hacer una figura, a menudo no queremos incluir los ejes. Para girar los ejes, seleccione Display → Axes → Off en la ventana principal de VMD.

Aumento de la resolución geométrica

Todos los objetos VMD se dibujan con una resolución ajustable, lo que permite a los usuarios equilibrar la finura de los detalles con la velocidad de dibujo.

5. Abra la ventana Representación gráfica a través de Gráficos → Representaciones ... en el menú principal de VMD. Modifique la representación predeterminada para mostrar sólo la proteína y muéstrela utilizando el método de dibujo VDW.

6. Acercar uno o dos de los átomos usando el ratón → Modo Escala (atajos).

Podría notar que al acercarse y acercarse un átomo, el átomo podría ser cortado por un plano de recorte invisible, lo que hace que sea difícil centrarse en un solo átomo. Esta es una característica de OpenGL. Puede mover el plano de recorte más cerca de usted haciendo lo siguiente: cambie el modo de mouse al modo de traducción, presionando la tecla de acceso directo "t" en la ventana de OpenGL o seleccionando Mouse → Translate Mode y arrastrando el ratón en el OpenGL mientras mantiene pulsada la tecla derecha del ratón. Ahora puede mover el plano de recorte más cerca de usted, o lejos de usted. Si esto no funciona, aquí hay una forma alternativa: en la ventana principal de VMD, seleccione Pantalla → Configuración de pantalla ...; En la ventana Configuración de pantalla que aparece, muchas opciones de OpenGL son ajustables; Disminuya el valor de Near Clip, lo que moverá el recorte de OpenGL más cerca, lo que le permitirá acercarse a los átomos individuales sin recortarlos.

7. Observe que con el ajuste de resolución por defecto, los átomos "esféricos" no parecen muy esféricos. En la ventana Representaciones gráficas, haga clic en la representación que configuró antes para que la proteína la resalte en amarillo. Trate de ajustar la resolución de Esfera a algo más alto, y vea qué diferencia puede hacer (Figura 10).

Figura 10

Figura 10

El efecto del ajuste de resolución. (A) Baja resolución: Resolución de esfera establecida en 8. (B) Alta resolución: Resolución de esfera establecida en 28.

La mayoría de los métodos de dibujo tienen un ajuste de resolución geométrica. Pruebe algunos métodos de dibujo diferentes y vea cómo sus resoluciones pueden aumentarse fácilmente. Cuando se producen imágenes, la resolución se puede elevar hasta que deja de hacer una diferencia visible.

## Colores y materiales

8. Hay un menú de material en la ventana Representaciones gráficas (que por defecto se establece en material opaco). Elija la representación de proteínas que hizo antes y experimente con los diferentes materiales en el menú Material.

9. Además de los materiales predefinidos en el menú Material, VMD también permite a los usuarios crear sus propios materiales. Para crear un nuevo material, en la ventana principal de VMD, seleccione Gráficos → Materiales ....

10. En la ventana Materiales que aparece, verá una lista de los materiales que acaba de probar y sus ajustes ajustables. Haga clic en el botón Crear nuevo. Se creará un nuevo material, Material 12. Déle los ajustes enumerados en la Tabla 4.

Cuadro 4

Cuadro 4

Ejemplo de un material definido por el usuario.

11. Vuelva a la ventana Representaciones gráficas. En el menú Material, Material 12 está ahora en la lista. Trate de usar el material 12 para una representación y ver lo que parece. También puede cambiar el nombre de los materiales en el menú Material.

Ahora es un buen momento para probar el modo de render de GLSL, si su computadora lo admite. En la ventana principal de VMD, seleccione Pantalla → Modo de presentación → GLSL. Este modo utiliza su tarjeta gráfica 3D para representar la escena con ray-tracing en tiempo real de esferas y transparencia alfa-mezclada, y puede mejorar la visualización de materiales transparentes. Consulte la Figura 11 para ver las representaciones realizadas en el modo GLSL.

Figura 11

Figura 11

Ejemplos de diferentes configuraciones de material. (A) El material transparente predeterminado, representado en el modo GLSL. (B) Un material definido por el usuario con alta transparencia, también renderizado en modo GLSG.

12. Si su computadora es compatible con GLSL Render Mode, puede intentar reproducir la figura 11. En primer lugar, active el modo de representación GLSL seleccionando Display → Rendermode → GLSL en la ventana principal de VMD.

13. Modifique el material 12 para que sea más transparente introduciendo los valores enumerados en la Tabla 5 en la ventana Materiales.

Tabla 5

Tabla 5

Ejemplo de un material más transparente.

14. Ocultar todas las representaciones actuales y crear las dos representaciones en la Tabla 6.

Cuadro 6

Cuadro 6

Ejemplo de representaciones dibujadas con diferentes materiales.

Percepción de profundidad

Dado que los sistemas moleculares son tridimensionales, VMD tiene múltiples formas de representar la tercera dimensión. En esta sección, se discute cómo usar VMD para mejorar u ocultar la percepción de profundidad.

15. Lo primero a considerar es el modo de proyección. En la ventana principal de VMD, haga clic en el menú Mostrar. Aquí podemos elegir entre Perspectiva u Ortográfica en el menú desplegable. Pruebe a cambiar entre los modos de proyección Perspectiva o Ortográfica y vea la diferencia (Figura 12).

Figura 12

Figura 12

Comparación de la perspectiva (A) y (B) de los modos de proyección ortográfica.

En modo de perspectiva, las cosas más cercanas a la cámara parecen más grandes. La proyección en perspectiva proporciona señales de profundidad visual basadas en el tamaño, pero la imagen visualizada no conservará las relaciones de escala o el paralelismo de las líneas, y los objetos muy cercanos a la cámara pueden aparecer distorsionados. La proyección ortográfica preserva las relaciones de escala y paralelismo entre los objetos de la imagen visualizada, pero reduce enormemente la percepción de profundidad. Por lo tanto, el modo ortográfico tiende a ser más útil para el análisis, porque la alineación es fácil de ver, mientras que el modo de perspectiva se utiliza a menudo para la producción de figuras y imágenes estereo.

Otra forma en que VMD puede representar la profundidad es a través de la llamada "profundidad cueing". La aproximación de profundidad se usa para mejorar la percepción tridimensional de estructuras moleculares, particularmente con proyecciones ortográficas.

16. Seleccione Pantalla → Cinturón de profundidad en la ventana principal de VMD.

Cuando se habilita la captura de profundidad, los objetos situados más lejos de la cámara se mezclan con el fondo. Los ajustes de los ajustes de profundidad se encuentran en Pantalla → Ajustes de pantalla .... Aquí se puede elegir la dependencia funcional del sombreado en la distancia, así como algunos parámetros para esta función. Para ver mejor el efecto de cueing de profundidad, es posible que desee ocultar la representación con el método de dibujo Surf.

17. Finalmente, VMD también puede producir imágenes estereo. En la ventana principal de VMD, mire el menú Pantalla → Estéreo, mostrando muchas opciones diferentes. Elija SideBySide (recuerde regresar al modo Perspective para obtener un resultado mejor). El resultado debe ser similar al de la Figura 13.

Figura 13

Figura 13

Imagen estereo de la proteína ubiquitina. Se muestra aquí con Cue Mode = Linear, Cue Start = 1.5 y Cue End = 2.75.

18. Desactive la imagen estéreo seleccionando Display → Stereo → Off en la ventana principal de VMD. También desactive la indicación de profundidad al desmarcar la casilla de verificación Display → Depth Cueing en la ventana principal de VMD.

#### Representación

Por ahora hemos visto algunas técnicas para producir vistas agradables y representaciones de la molécula cargada en VMD. Ahora, exploraremos el uso de la función integrada de instantáneas VMD y programas de renderización externos para producir imágenes de alta calidad de su molécula. El renderizador de "instantánea" guarda la imagen en pantalla en la ventana de OpenGL y es adecuado para su uso en presentaciones, películas y pequeñas figuras. Cuando se desea imágenes de mayor calidad, los renderizadores como Tachyon y POV-Ray son mejores opciones.

19. Ocultar o eliminar todas las representaciones anteriores y crear las cuatro nuevas representaciones enumeradas en la Tabla 7.

#### Cuadro 7

#### Cuadro 7

Ejemplo de representaciones.

20. Una vez que la escena se haya configurado de la forma que desee en la ventana de OpenGL, simplemente seleccione Archivo → Render ... en la ventana principal de VMD. Aparecerá la ventana Controles de procesamiento de archivos en la pantalla.

21. Los Controles de procesamiento de archivos le permiten elegir el procesador que desea usar y el nombre de archivo para su imagen. Seleccione "snapshot" para el método de renderizado, escriba un nombre de archivo de su elección y haga clic en Rendering.

22. Si está utilizando una máquina Mac o Linux, una aplicación de procesamiento de imágenes puede abrirse automáticamente para mostrarle la molécula que acaba de procesar con Snapshot. Si este no es el caso, utilice cualquier aplicación de procesamiento de imágenes para echar un vistazo al archivo de imagen. Cierre la aplicación cuando haya terminado de continuar utilizando VMD.

El renderizador de instantáneas guarda exactamente lo que se muestra en la ventana de visualización de OpenGL; de hecho, si otra ventana superpone la ventana de visualización, puede distorsionar la región superpuesta de la imagen.

23. Intente procesar de nuevo utilizando diferentes métodos de renderizado, particularmente TachyonInternal y POV3. Compare la calidad de las imágenes creadas por los diferentes procesadores.

Los otros procesadores (por ejemplo, POV3 y Tachyon) reprocesan todo, por lo que puede no verse exactamente igual que en la ventana de OpenGL. En particular, no "acortan" u ocultan objetos muy cerca de la cámara. Si selecciona Pantalla → Configuración de pantalla ... en la ventana principal de VMD, puede establecer Near Clip en 0.01 para obtener una mejor idea de lo que aparecerá en su representación.



24. Salga de VMD.

## TRABAJAR CON TRAJECTORES Y HACER PELÍCULAS

Las coordenadas que evolucionan en el tiempo de un sistema se denominan trayectorias. Son más comúnmente obtenidos a partir de simulaciones de sistemas moleculares, pero también pueden ser generados por otros medios y con diferentes propósitos. Al cargar una trayectoria en VMD, se puede ver una película de cómo el sistema evoluciona en el tiempo y analizar diversas características a lo largo de la trayectoria. Esta sección presentará los fundamentos de trabajar con datos de trayectoria en VMD. También aprenderá a analizar los datos de trayectoria en los Protocolos Básicos 14, 15 y 16.

## Anexo 4 Software RasMol

### Ejecutando RasMol bajo UNIX o VMS

Para arrancar RasMol desde el inductor de UNIX o el de VMS, teclee el comando 'rasmol'. A continuación del comando puede añadir un nombre de archivo. Por defecto, inmediatamente del arranque el programa visualiza el siguiente mensaje, para identificar el número de versión y la profundidad de visualización del programa que se va a correr: Habrá algunas variaciones en este mensaje en función de su elección de plataforma:

RasMol Molecular Renderer

Roger Sayle, August 1995

Copyright (C) Roger Sayle 1992-1999

Version 2.7.2.1 April 2001

Copyright (C) Herbert J. Bernstein 1998-2001

\*\*\* See "help notice" for further notices \*\*\*

[32-bit version]

Inmediatamente debajo de este mensaje aparece el inductor de la línea de comandos de 'RasMol'. Si el programa se ejecuta en un sistema X windows, el programa determina el tipo de visualización que se emplea. Si la pantalla tiene un tampón de marco de color de 8 bit o de 24 bit, RasMol crea otra ventana, que se usa para visualizar opciones de menú y las imágenes que RasMol devuelve. Si hay solo una ventana disponible, RasMol solo podrá ser empleado desde la línea de comandos. Los comandos pueden ser escritos para manipular el modelo, y para dar salida a la imagen generada hacia un archivo de salida.

Si el programa corre bajo entorno X Windows con una ventana de color disponible, RasMol crea una ventana adicional para exhibir la molécula dada interactivamente, conforme es manipulada. Si RasMol no corre bajo entorno X Windows, el programa responderá con el mensaje "No se detectó un display utilizable". RasMol puede ser manejado de forma que no presente una ventana gráfica, usando la opción de línea de órdenes "nodisplay". Esto es particularmente útil para usar RasMol como proceso en "en el fondo" (batch).

Es posible especificar el nombre de un archivo de coordenadas o bien de un **script**, o ambos, en la línea de órdenes UNIX/VMS. El formato para hacerlo es añadir la opción "- **script** "nombre de archivo" a la línea de comandos. Un archivo de coordenadas puede cargarse colocando su nombre en la línea de órdenes, precedido de la opción del formato de archivo. Si no se especifica el tipo de

archivo, por defecto se asumirá que es PDB. Las opciones válidas son: '-pdb', '-mdl', '-mol2', '-xyz', '-alchemy' o '-charmm', que se corresponden a Brookhaven, MDL Mole, Sybyl Mol2, xyz de MSC, Alchemy y CHARMM respectivamente. Si simultáneamente se especifican tanto un archivo, como un **script** en la línea de comandos, la molécula se carga primero y después los comandos del **script** se aplican a él. Si el archivo no se encuentra, el programa muestra el mensaje de error "Error: File not found!" y el usuario recibe el inductor de RasMol.

Para cerrar RasMol, el usuario puede escribir el comando "quit" en el inductor de "RasMol", y el programa volverá al inductor de usuario de UNIX. Alternativamente, si un inductor distinto del principal de RasMol se visualiza, el usuario puede pulsar control-C (^C) para dejar el programa. El mensaje '\*\*\*Quit\*\*\*' aparece en la consola, antes del usual inductor de unix sea mostrado de nuevo. Otra forma de terminar el programa es seleccionando la opción Quit del menú, al fondo del menú principal.

#### Ejecutando RasMol bajo Microsoft Windows

Para arrancar RasMol en Microsoft Windows, haga doble clic en el icono RasMol del gestor de programas. Cuando RasMol arranca por primera vez el programa muestra una ventana principal única con un fondo negro y además provee de una ventana para la línea de comandos, minimizada, como un icono (win 3.x) o en la barra de funciones (95 y NT). La línea de comandos puede ser maximizada.

Se puede especificar el nombre de un archivo de coordenadas atómicas o el nombre de un **script** o ambos en la ventana de línea de comandos. El formato será para un archivo **script** añadir la opción '- **script** <nombre-del-archivo>' a la línea de comando. Un archivo de coordenadas moleculares se especifica escribiendo su nombre en la línea de comandos, opcionalmente precedido por la opción de tipo de formato. Si no se especifica el tipo de archivo, por defecto se asumirá que es PDB. Las opciones válidas son: '-pdb', '-mdl', '-mol2', '-xyz', '-alchemy' o '-charmm', '-mopac' y 'CIF' que se corresponden con los formatos Protein Data Bank, Mol de Molecular Design Limited, Sybyl Mol2 de Tripos, XMOL xyz de MSC, Alchemy de Tripos, CHARMM, MOPAC de J. P. Stewart y CIF o mmCIF de la Unión Internacional de Cristalografía, respectivamente. Si simultáneamente se especifican tanto un archivo, como un **script** en la línea de comandos, la molécula se carga primero y después los comandos del **script** se aplican a él. Si el archivo no se encuentra, el programa muestra el mensaje de error "Error: File not found!" y ante el usuario recibe el inductor de RasMol.

#### Ejecutando RasMol en el Macintosh/PPC de Apple

Para usar RasMol en un Macintosh, haga doble clic en el icono de RasMol empleando "Finder". Al empezar RasMol el programa muestra dos ventanas, la de encima (con el fondo negro) es la ventana gráfica o "canvas" y la de abajo (de fondo blanco) es la ventana de la línea de comandos de RasMol. RasMol en un

Macintosh puede arrancar, también clicando por duplicado en un archivo creado por la aplicación con la firma 'RSML'. Esto arrancará la aplicación y dará paso al archivo seleccionado para ser cargado. No hay forma de especificar el formato del archivo en la línea de órdenes en un Macintosh por lo que RasMol tiene que determinar el tipo de formato del archivo inspeccionando el nombre. Los archivos del tipo 'RSML' se asume que son **script** de RasMol, los del tipo 'mMOL' son asumidos como archivos MDL Mol y todos los demás (principalmente 'TEXT') se asume que están en formato PDB. A diferencia de las demás versiones de RasMol es imposible de especificar simultáneamente un **script** y un archivo de coordenadas.

Arrastrando y soltando (dragging and dropping) los archivos **script** sobre alias, o accesos directos de RasMol pueden fracasar debido a errores respecto al directorio correcto. Hacer doble clic sobre un " **script** puede tener las mismas consecuencias si existen diferentes copias del programa.

Note que debido a que en un Macintosh solo una ocurrencia de cada aplicación puede correrse cada vez, si hiciera doble clic sobre otra archivo clasificado como 'RSML', la copia activa de RasMol expulsará ([zap](#)) la molécula en uso y la substituirá por la recién clicada.

La ventana de RasMol

En cualquier plataforma RasMol muestra dos ventanas, la principal de **gráficos** o **canvas** de fondo negro y una segunda ventana para la **línea de comandos** o ventana **terminal**. Encima de la ventana gráfica (en un Macintosh en la parte superior de la pantalla) está la barra de menús de RasMol. El contenido de esta barra cambia de plataforma a plataforma para soportar las líneas generales de la interfase gráfica de usuario, sin embargo todas las plataformas soportan los menús desplegados 'File', 'Display', 'Colours', 'Export' y 'Options'. La ventana gráfica tiene dos barras de desplazamiento (scroll) a la derecha y abajo que pueden ser usadas para mover, interactivamente, la molécula.

Mientras el puntero del ratón está localizado en el área de gráficos de la ventana principal, este será representado como una cruz, para poder centrar los objetos susceptibles de ser [picados](#); en cualquier otro caso aparecerá como una punta de flecha. Cualquier carácter que sea escrito en el teclado mientras la ventana gráfica esté 'enfocada' (lo que quiere decir que está activa) se redirecciona a la ventana de la línea de órdenes. Esto le proporciona la facilidad de no tener que pasar de una a otra ventana para dar órdenes a RasMol.

La ventana principal puede redimensionarse en cualquier momento de la sesión. Lo cual tiene por efecto reescalar la imagen visualizada, si la hubiera. RasMol impone como límites al tamaño de la ventana el permitir visualizar las barras de desplazamiento y el menú superior, y que todo junto ocupe una única pantalla. En máquinas con insuficiente memoria de video los intentos de agrandar la ventana

pueden fracasar, en cuyo caso RasMol produce el mensaje de error 'Renderer Error: Unable to allocate frame buffer!' o similar (según el sistema operativo en que corra).

En los sistemas de visualización de 8 bits, cuando el número de colores requerido por el programa exceda los colores libres en la pantalla, el programa usa su propio mapa de colores. El efecto es que temporalmente todo lo que aparezca en la pantalla que no sea la ventana gráfica de RasMol aparece en falsos colores cuando el puntero del ratón esté sobre dicha pantalla. Si el puntero del ratón se desplaza fuera de la pantalla de visualización de RasMol, los colores originales de la otra ventana vuelven, y la imagen sobre el fondo es a su vez mostrada en falso color. En cuanto el número de colores requerido vuelve a los límites de la capacidad de la pantalla vuelve la normalidad.

Acción	Windows	Macintosh
Rotar X,Y	Izquierda	No modificado
Trasladar X,Y	Derecha	Comando*
Rotar Z	Shift-derecha	Shift-Commando*
Zoom	Shift-izquierda	Shift
Plano seccionado (slab)	Ctrl-izquierda	Ctrl

### Controles del ratón

Aquí se presenta un resumen de los controles clic-y-arrastra de ratón de RasMol. El comando [set mouse](#) por defecto está ajustado a **set mouse rasmol**, que proporciona los controles resumidos a continuación. Sin embargo, también existen los modos **set mouse insight** y **set mouse quanta** (que no se muestran aquí).

\*En algunos Macs, la opción (Alt) tecla tiene el mismo efecto que el comando "key" de RasMol.

## Barras de desplazamiento (Scroll)

La barra de desplazamiento (scroll bar) que atraviesa la parte inferior del marco se usa para rotar la molécula sobre el eje y, i.e. gira el punto mas próximo de la molécula a derecha o izquierda, mientras que la de la derecha del marco lo hace sobre el eje x, i.e. el punto mas próximo sube o baja. Cada una de estas barras tiene un indicador que señala la posición relativa de la molécula. El punto inicial de este indicador es el centro de cada barra. Esta barra de desplazamiento puede ser operado en otras dos formas. La primera pulsando cualquier botón del ratón en cualquier punto de la barra de desplazamiento, indicando una rotación relativa respecto a la posición actual. El segundo es picando una de las flechas en los extremos de las barras rotando la moléculas en valores fijos. Rotar la molécula por el segundo método puede causar que los indicadores de las barras de desplazamiento salten de un extremo a otro de la barra. Eso indica una revolución completa (desplazamiento de toda la longitud de la barra). El ángulo girado usando las flechas depende del tamaño de la ventana.

## Picando

Para identificar un átomo o enlace concreto que esté visualizándose, RasMol permite al usuario picar sobre cualquier objeto que está en pantalla.. El ratón es utilizable para este fin siempre que esté mostrando como puntero la cruz, y que este puntero se encuentre sobre el objeto que se desea seleccionar. En ese momento pulsar cualquier botón del ratón tiene como resultado seleccionarlo. En el caso de que el ratón no este, exactamente sobre un objeto RasMol se encarga de adjudicar la selección al átomo más próximo.

El programa dará como salida en la ventana terminal (la de la línea de comando), el tipo atómico, número de serie, nombre y número del residuo. Si el átomo forma parte de una cadena con nombre, este también se visualiza.. A continuación se dan dos ejemplos de la salida generada seleccionando un átomo:

```
Atom: CA 349    Group: SER 70
```

```
Atom: O 526    Hetero: HOH 205  Chain: P
```

La primera línea describe el carbono alfa de la serina 70 de una proteína El número de serie de PDB para este átomo es el 349. La siguiente línea describe el átomo de oxígeno de una molécula de agua unida a la cadena P de la molécula principal. La palabra 'Hetero' distingue las moléculas heterogéneas (p. e. cofactores) de los residuos de la molécula principal, anotada como 'Group'. [Estos dos átomos son descritos por las dos expresiones 'SER70.CA' y 'HOH205:P.O', respectivamente, cuando se usan los comandos de RasMol **select** y **restrict**.]

Clicar el ratón sobre un átomo puede ser una forma de identificarlo (orden **identify**), pero también para hallar las distancias (**distances**) entre dos átomos (o para activar un monitor distante (**distance monitor**)), o el angulo de

enlace (**the bond angle**) definido por 3 átomos, el ángulo de torsión (**torsion angle**) definido por 4 átomos, activar o desactivar las etiquetas (**labels on** o **off**), o para especificar el centro de rotación (**center of rotation**). Véase la orden [set picking](#) para detalles.

Caja de control Si RasMol detecta una caja de control unida al puesto de trabajo del usuario, automáticamente se podrá manipular la molécula interactivamente con los mandos. Una vez que RasMol arranca, marca los visualizadores LED sobre cada mando, 'ROTATE X', 'ROTATE Y', 'ROTATE Z' y 'ZOOM' en la fila superior de izquierda a derecha, y 'TRANS X', 'TRANS Y', 'TRANS Z' y 'SLAB' de izquierda a derecha en la fila de abajo. Rotando cada uno de los botones automáticamente se transformará y revisualizará, interactivamente, la molécula. Los controles solo serán activos mientras el puntero del ratón esté sobre la ventana gráfica. Si varias aplicaciones simultáneamente usan la caja de controles, deben recordarse las etiquetas o marcas asignadas a cada programa, ya que cada aplicación puede sobrescribir en los LEDs.

La rotación sobre los ejes X e Y actualizará automáticamente los indicadores en las barras de desplazamiento apropiadas. Todos los mandos de rotación giran la molécula 180 grados por cada vuelta completa del mando. El resto de los botones adecuan sus valores a los rangos permitidos; girar esos diales más allá de sus límites no provoca efecto alguno. El centro de rotación de la molécula puede cambiarse con el comando [centre](#) desde la línea de comandos, o con la orden [set picking centre](#) seguidos por un clic de ratón.

El mando 'ZOOM' permite ampliar interactivamente la molécula entre el 10% y el 200% del tamaño fijado por defecto como el original. Girando el dial en el sentido de las agujas del reloj aumenta el tamaño de la molécula y en el contrario la disminuye. Una revolución del mando se corresponde con el 100% de cambio de tamaño.

El mando 'SLAB', que solo es efectivo cuando la opción **slab** está activada, permite al usuario desplazar el plano frontal desde el punto más próximo al más lejano. Una rotación completa del botón **slab** se corresponde con un movimiento equivalente a la mitad de la distancia entre él más próximo y él más lejano de la molécula. El giro en el sentido de las agujas del reloj acerca el plano al usuario (incrementando el número de objetos visibles), y el contrario lo aleja (eliminando objetos de la visualización).

El modo de rebanado (**slab**) tecleando la orden 'slab on' en la línea de comandos o activando la opción slab del menú de opciones.

Desplazar a lo largo de los ejes X e Y permite mover el centro de la molécula en la zona gráfica de la pantalla. Rotación y ampliación también se ejecutan respecto al centro de rotación y al de la molécula, respectivamente, que a menudo pueden no

coincidir con el centro de la zona gráfica. El mando TRANS Z no tiene efecto por el momento.

### Interface de línea de comandos

RasMol permite ejecutar comandos de forma interactiva tecleándolos en la ventana de terminal (command line). Los caracteres tecleados son procesados en la línea de comandos. Cada orden debe darse como una línea separada terminada pulsando retorno de carro. Las palabras clave (órdenes o comandos) son caso insensibles y por tanto no diferencian mayúsculas de minúsculas. Todos los espacios en blanco (así como tabuladores y alimentación de hojas), excepto aquellos que separan palabras clave de argumentos, son ignorados. Una restricción interna limita el tamaño de la línea a 256 caracteres. Los delimitadores de cadenas son las comillas dobles o sencillas. La colocación del carácter "número" # o sostenido (a veces en español se le llama barrilete) sin comillas termina la línea, lo que permite su uso para líneas de comentarios.

Si se detecta un error sintáctico a la entrada de un comando interactivo, RasMol indica la localización del error en la orden colocando el carácter '^' debajo de la palabra o letra incorrecta o incoherente, y escribiendo un mensaje de error en la línea siguiente. Si el comando no es reconocido por RasMol, el programa genera el texto 'Unrecognised command!' y restaura el inductor (prompt principal). Si la línea incluye información no requerida al final del comando y los argumentos, RasMol ejecutará el comando, pero mostrará el texto de advertencia 'Warning: Ignoring rest of command!'. Algunas órdenes pueden pedir al usuario mas información. Cuando ocurre así aparece un inductor diferente que se discutirá en la sección referencia de órdenes.

Cuando RasMol da como salida de pantalla un mensaje de error de diagnóstico o de aviso debido a la selección inadecuada de una orden alojada en los menús desplegables, la línea de órdenes actual se limpia. El inductor se revisualiza a continuación del mensaje interno.

### Edición de la línea de órdenes

RasMol permite una edición básica de la línea de comandos. Tanto la tecla espacio atrás (backspace), como suprimir (delete), como ^H (Control-H) borra el carácter previo, mientras que ^D puede usarse para eliminar el carácter que hay bajo el cursor. Otros varios caracteres pueden emplearse para mover el cursor a lo largo de la línea. Los caracteres ^B, ^F, ^A y ^E mueven el cursor atrás un único espacio, adelante un solo espacio, al principio de la línea, o al final de ella, respectivamente. Si el cursor no está al final de la línea, los caracteres tecleados se insertan en la línea sin eliminar a los existentes. Tras la edición un retorno de carro entrará la información, sin importar donde esté el cursor. Ya que RasMol es incapaz de mover el cursor arriba, a la anterior línea, se debe cuidar la edición de



comandos que ocupen varias. En el caso de otro proceso interrumpa o interfiera con la edición, el carácter ^L puede usarse para revisualizar la línea en pantalla.

RasMol mantiene una historia de las órdenes usadas recientemente, de tal forma que no se necesita reescribir repetidamente. Control P ^P en la línea de comandos recupera el anterior comando y control N ^N el siguiente. Estas órdenes pueden ser editadas como se describe mas adelante. Moviéndose atrás y adelante en la historia de las órdenes se deshacen las modificaciones creadas en la orden editada. El número de comandos retenidos depende de su longitud. RasMol puede retener mas órdenes cortas y menos si son largas.

Los usuarios de Microsoft Windows o de X windows y aquellos con un terminal 'vt100' compatible (como p.e. un 'xterm') pueden usar los caracteres de control del teclado para el puntero (las flechas) para hacer mas rápida la manipulación de la historia de órdenes. Las flechas derecha e izquierda tienen el mismo efecto que control F ^F y control B ^B, y mueven adelante y atrás un carácter cada vez.. Las flechas arriba y abajo simulan ^P y ^N, evocando las órdenes anterior y posterior respectivamente.

Los Usuarios de la versión para Macintosh pueden usar las cuatro flechas del cursor para desplazarse arriba y abajo por las sucesivamente ejecutadas líneas de órdenes; y atrás y adelante en una línea concreta. Pulsar 'return' o 'enter' en cualquier momento lleva a la ejecución del contenido de la línea actual, e.g. seleccionada o editada.

### **Dimensiones en RasMol**

Todas las dimensiones en RasMol, como radios y distancias, pueden especificarse tanto en unidades RasMol como en Angstroms. Las unidades RasMol fueron creadas para poder especificar valores de tamaños razonables para operaciones ejecutadas en RasMol. Una unidad RasMol se corresponde con 1/250 de Angstrom, así que sus valores aparecen principalmente como cientos. Por esta razón, si a RasMol se le da una distancia dada en cifras que no contengan decimales se asume que son unidades RasMol. Por ejemplo, el comando 'spacefill 300' especifica una esfera con un radio de 300 unidades RasMol, o sea 1.2 Angstroms.

Sin embargo, las dimensiones en RasMol se pueden especificar, también, en Angstroms colocando un punto decimal en el número. Por ejemplo, 'spacefill 1.2' especifica una esfera con el radio en Angstroms. Esto es particularmente útil para la distancia de corte en expresiones con parámetro 'within' (en).

### **Archivos de inicialización de arranque**

Cada vez que se arranca RasMol, busca un archivo de comandos de inicialización para ejecutarlo antes de presentar el prompt (inductor)al usuario. Este archivo se

llama **.rasmolrc** en sistemas UNIX, y **RASMOL.INI** en sistemas VMS y Microsoft Windows. El formato y la ejecución de este archivo es idéntico tal de un archivo **script** de RasMol.

RasMol busca, en primer lugar, el archivo de inicialización en el directorio actual, y si no lo encuentra, en el hogar ("home") del usuario. En todos los sistemas la variable de entorno **HOME** se puede emplear para nombrar el directorio hogar apropiado. Si no existe un archivo personal de inicialización se leerá el archivo **rasmolrc** (o **RASMOLRC**) en el directorio del sistema RasMol al que apunte la variable de entorno **RASMOLPATH**. Este directorio debería contener también el archivo de ayuda on-line **rasmol.hlp**. En sistemas UNIX, **RASMOLPATH** se ajusta, típicamente para ser '/usr/local/lib/rasmol'.

A diferencia de la orden **script**, **.rasmolrc**, no generará un mensaje de error si no encuentra el archivo. El archivo del sistema **rasmolrc** se emplea comúnmente por los gestores de sistemas para visualizar información sobre la instalación local y para que quien necesita ayuda reciba una orden eco de RasMol detallando un número de teléfono, o dirección de correo electrónico para contactar.

#### Comunicación entre procesos



RasMol soporta Comunicación entre procesos (Inter Process Communication (IPC)) en una u otra forma, en cualquier plataforma. En Microsoft Windows, IPC se implementa usando Dynamic Data Exchange (DDE), en un Macintosh IPC se implementa usando Apple Events y en un sistema X Windows IPC se implementa usando el protocolo de comunicación de John Ousterhaut Tcl/Tk.




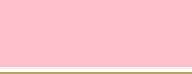










Cuando RasMol arranca en un sistema **X window** se registra ante el servidor X window como un **interprete Tcl**. Desde una aplicación Tcl tal como 'wish', se puede usar órdenes Tcl 'wininfo interps' para determinar el interprete registrado actualmente en la pantalla. En primera instancia RasMol se registra como 'rasmol', en segunda instancia como 'rasmol2', en tercera como 'rasmol #3' y así sucesivamente. El interprete Tcl puede fácilmente enviar una orden a rasmol empleando el comando **send** interconstruido. RasMol interpreta el parámetro de cadena para la orden **send** no como una función Tcl para ejecutar, sino como una orden de RasMol. Así, teclear 'send {rasmol} {background red}' en el interprete deseado causará que la ventana de visualización de RasMol cambie de color. Usando lo mismo codificado como protocolo Microsoft's DDE Execute, pueden enviarse órdenes múltiples en un único 'send', colocando los comandos consecutivamente entre corchetes. RasMol ejecutará todos los comandos que haya en un 'send' antes de refrescar una pantalla.

En **Microsoft Windows**, RasMol soporta un protocolo DDE completo. Las funciones más simples son accesibles enviando una orden de ejecución DDE a la aplicación 'RasWin' y alguna especificación. Esto arrancará una conversación DDE con la más recientemente arrancada instancia de RasMol. Aunque cualquier tema puede ser especificado, se recomienda emplear 'System' y/o 'RemoteControl'. De nuevo los contenidos del paquete ejecutable es una cadena para su ejecución por RasMol. Si el primer carácter distinto de espacio en blanco es una apertura de corchetes, la cadena se interpreta como una secuencia de órdenes encadenadas entre corchetes; pero la cadena puede constar de un único comando. Los comandos entre corchetes opcionalmente pueden separarse por espacios y/o dos puntos. RasMol puede también actuar como un 'servidor de datos' soportando uniones (links) calientes, fríos y templados. Los items DDE actualmente soportados incluyen 'Name', 'Image', 'Pick', 'Count' que significan nombre de molécula, imagen actualmente visualizada (en formato Microsoft DIB), la expresión átomo del último átomo picado (o una cadena vacía) y el número de átomos seleccionados, respectivamente. Usar un enlace caliente o templado (hot o warm link) en el item 'Pick', p.e., permite que una aplicación como Microsoft Word, Excel o Visual Basic responda cada vez que el usuario pica un átomo en RasMol.

RasMol en un **Apple Macintosh** soporta **AppleEvents**. Actualmente solo soporta los cuatro sucesos del núcleo, abrir aplicación, abrir documento, imprimir documento y salir de todo, ya que abrir documento determina sus acciones por la firma de tipo de documento se puede usar para implementar un IPC genérico. Debido a que RasMol para Macintosh trata todos los archivos de tipo 'RSML' como **script** (guiones), solo se necesita que la aplicación que envía coloque todos los comandos para ser ejecutados en un archivo temporal, ajustar el tipo del archivo a 'RSML' y entonces enviar a RasMol un "abrir documento AppleEvent" con el nombre del archivo como parámetro.

En el esquema CPK de colores, RasMol intenta asignar un color a cada elemento de la tabla periódica a partir de una tabla de 16 colores (los códigos de colores listados son solo una ayuda a la comprensión del mapa, pero no son usados por el programa RanMol):

Código	Nombre del color	Muestra	Valores RGB	Hexadecimal
LG	Gris claro (Light Grey)		[200,200,200]	C8C8C8
SB	Azul celeste (Sky Blue)		[143,143,255]	8F8FFF

<b>R</b>	<b>Rojo (Red)</b>		[240, 0, 0]	F00000
<b>Y</b>	<b>Amarillo (Yellow)</b>		[255,200, 50]	FFC832
<b>W</b>	<b>Blanco (White)</b>		[255,255,255]	FFFFFF
<b>Pk</b>	<b>Rosa (Pink)</b>		[255,192,203]	FFC0CB
<b>Go</b>	<b>Amarillo dorado (Golden Rod)</b>		[218,165, 32]	DAA520
<b>Bl</b>	<b>Azul (Blue)</b>		[ 0, 0,255]	0000FF
<b>Or</b>	<b>Naranja (Orange)</b>		[255,165, 0]	FFA500
<b>DG</b>	<b>Gris oscuro (Dark Grey)</b>		[128,128,144]	808090
<b>Br</b>	<b>Castaño (Brown)</b>		[165, 42, 42]	A52A2A
<b>P</b>	<b>Púrpura (Purple)</b>		[160, 32,240]	A020F0
<b>DP</b>	<b>Rosa intenso (Deep Pink)</b>		[255, 20,147]	FF1493
<b>G</b>	<b>Verde (Green)</b>		[ 0,255, 0]	00FF00
<b>FB</b>	<b>Rojo ladrillo (Fire Brick)</b>		[178, 34, 34]	B22222
<b>FG</b>	<b>Verde bosque (Forest Green)</b>		[ 34,139, 34]	228B22

1a	2a	3b	4b	5b	6b	7b	8	1b	2b	3a	4a	5a	6a	7a	0
H 1 W															He 2 Pk
Li 3 FB	Be 4 DP									B 5 G	C 6 LG	N 7 SB	O 8 R	F 9 Go	Ne 10 DP
Na 11	Mg 12									Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	Ar 18

BI	FG											DG	Go	Or	Y	G	DP
K 19 DP	Ca 20 DG	Sc 21 DP	Ti 22 DG	V 23 DP	Cr 24 DG	Mn 25 DG	Fe 26 Or	Co 27 DP	Ni 28 Br	Cu 29 Br	Zn 30 Br	Ga 31 DP	Ge 32 DP	As 33 DP	Se 34 DP	Br 35 Br	Kr 36 DP
Rb 37 DP	Sr 38 DP	Y 39 DP	Zr 40 DP	Nb 41 DP	Mo 42 DP	Tc 43 DP	Ru 44 DP	Rh 45 DP	Pd 46 DP	Ag 47 DG	Cd 48 DP	In 49 DP	Sn 50 DP	Sb 51 DP	Te 52 DP	I 53 P	Xe 54 DP
Cs 55 DP	Ba 56 Or	La 57 DP	Hf 72 DP	Ta 73 DP	W 74 DP	Re 75 DP	Os 76 DP	Ir 77 DP	Pt 78 DP	Au 79 Go	Hg 80 DP	Tl 81 DP	Pb 82 DP	Bi 83 DP	Po 84 DP	At 85 DP	Rn 86 DP
Fr 87 DP	Ra 88 DP	Ac 89 DP															
Lanthinide Series	Ce 58 DP	Pr 59 DP	Nd 60 DP	Pm 61 DP	Sm 62 DP	Eu 63 DP	Gd 64 DP	Tb 65 DP	Dy 66 DP	Ho 67 DP	Er 68 DP	Tm 69 DP	Yb 70 DP	Lu 71 DP			
Actinide Series	Th 90 DP	Pa 91 DP	U 92 DP	Np 93 DP	Pu 94 DP	Am 95 DP	Cm 96 DP	Bk 97 DP	Cf 98 DP	Es 99 DP	Fm 100 DP	Md 101 DP	No 102 DP	Lr 103 DP			

Para modelos de proteínas y de ácido nucleicos de cristalografía de rayos X (es decir, sin hidrógenos) la visualización puede ser 'abrillantada' convirtiendo los átomos de O, C, y N de los colores **cpk** que RasMol tiene por defecto, a rojo, blanco y azul verdaderos ("red, white, blue") usando el esquema de color predefinido de RasMol.

## Anexo 5 Hilos moleculares basados en polímeros de coordinación

### Nanoquímica

La búsqueda de materiales con potenciales aplicaciones nanotecnológicas tiene como objetivo fundamental el diseño y la síntesis de nuevas sustancias o entidades moleculares capaces de autoorganizarse persiguiendo un determinado fin o en las que cabe destacar una determinada propiedad.

Son especialmente demandadas las organizaciones moleculares capaces de conducir la electricidad a nivel molecular con una resistencia razonablemente baja. Sin ninguna duda, esto abriría nuevas puertas para futuras aplicaciones en el campo de la Nanoquímica. La Nanoquímica es una rama de la Química del Estado Sólido que trata sobre aspectos referentes a la síntesis y manipulación de materiales con tamaño nanométrico en una, dos o tres dimensiones.<sup>61</sup> Esta nueva rama de la química trata de estudiar, obtener y manipular de forma controlada materiales de dimensiones nanométricas. Es una ciencia marcadamente multidisciplinar ya que en ella confluyen un amplio conjunto de técnicas y diversas disciplinas científicas.

El interés suscitado por los nanomateriales se debe a sus propiedades, que en algunos casos dependen de su pequeño tamaño. Por ejemplo, al reducir su tamaño al nanómetro de espesor materiales inertes adquieren propiedades catalíticas, como en el caso del platino, y materiales aislantes o semiconductores se vuelven conductores, como ocurre con el silicio.

La habilidad de procesar objetos nanométricos en una superficie tiene un gran potencial en importantes aplicaciones, entre otras en la construcción de dispositivos electrónicos con dimensiones atómicas. La nanoelectrónica trata de miniaturizar y trasladar a nanoescala diversos componentes electrónicos.

En estos momentos los laboratorios de materiales semiconductores están desarrollando transistores conectados con hilos cada vez más pequeños para la fabricación de nuevos chips de tamaño más reducido. A finales de 2008, la empresa estadounidense Intel comenzó la producción del microprocesador Itanium® Tukwila. Se trata del primer microprocesador del mundo con 2 billones de transistores. Sus componentes se encuentran agrupados en paquetes de 65 nm. Está previsto que su rendimiento sea de más del doble de su antecesor, el modelo Itanium® 9000 series, que fue introducido en 2006, tiene 1720 millones de componentes y está formado por celdas de 90 nm.<sup>72</sup> Es fundamental para el

---

<sup>6</sup> Ozin, G.; Arsenault, A. C. "Nanochemistry, A Chemical Approach to Nanomaterials" RSC Publishing, 2005.

<sup>7</sup> Información extraída de la página web <http://www.intel.com>, marzo 2009. 3 (a) Gates, B. D. Chem. Rev. 2005, 105, 1171-1196 (b) Barth, J. V. Nature 2005, 437,671-679.

desarrollo tecnológico encontrar nuevos nanomateriales conductores que permitan obtener microchips cada vez más pequeños y potentes.

La organización de la materia a escala nanométrica se ha conseguido hasta la fecha mediante dos aproximaciones que son las denominadas “de arriba a abajo” (o “top-down”) y “de abajo a arriba” (o “bottom-up”).<sup>3</sup> La primera tiene su base en técnicas litográficas y sus límites se encuentran en la escala de las decenas de nanómetros, permitiendo en la actualidad lograr organizaciones con resolución próxima a 15 nm. Se basa en la fabricación de los motivos estructurales sobre el propio sustrato, como es el caso de la escritura con fuente de electrones y la litografía empleando radiación ultravioleta extrema.

Entre los inconvenientes de estos métodos se encuentran la necesidad de grandes equipos para realizar vacío o radiación de alta energía, por lo que para fabricar a esta escala parece imprescindible desarrollar otras alternativas. Por otro lado, la técnica “de abajo a arriba” se basa en la síntesis de moléculas que se ensamblan sobre la superficie deseada para alcanzar dimensiones de varios nanómetros (figura 1.1).

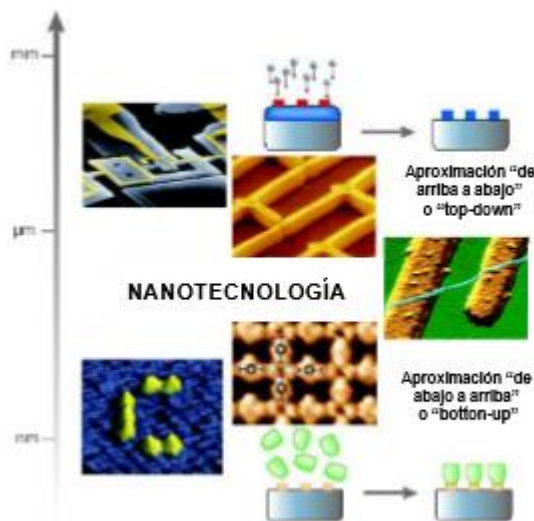


Figura 1.1. Aproximaciones para controlar la materia a escala nanométrica. 3b

La demanda de nuevos materiales hace que las técnicas utilizadas hasta ahora traten de ser suplantadas por metodologías de tipo molecular. Es necesaria la búsqueda de moléculas que puedan ser utilizadas como componentes de circuitos integrados y de componentes electrónicos, ya que la industria microelectrónica convencional está alcanzando el límite para la miniaturización de los componentes semiconductores. Las moléculas tienen la ventaja de ser aproximadamente  $10^6$  veces más pequeñas que los dispositivos actuales de silicio, ofreciendo enormes posibilidades como componentes de los dispositivos electrónicos del futuro. La técnica “de abajo a arriba” tiene como objetivo la organización de nanoestructuras

en una superficie mediante el ensamblaje de átomos y moléculas. Se puede controlar la dimensionalidad y periodicidad de las nanoestructuras formadas mediante la adecuada selección de los bloques de construcción que las componen. Es de vital importancia la síntesis de bloques de construcción con una composición y tamaño adecuados de tal modo que su autoensamblaje de lugar a la formación de organizaciones supramoleculares con las propiedades deseadas. En definitiva, los dispositivos nanoelectrónicos requieren del empleo de hilos moleculares. Podemos definirlos como moléculas largas y monodimensionales que sean capaces de transportar cargas eléctricas con razonablemente baja resistividad entre dos puntos de un circuito. Además, estas moléculas requieren de otras características que las hagan útiles como estabilidad adecuada, manipulación y síntesis fácil y sobre todo tienen que permitir generar nanoestructuras mediante autoensamblaje.

Los dispositivos electrónicos moleculares tienen un futuro muy prometedor. Además de una posible respuesta a las necesidades de miniaturización existentes en el campo de la nanoelectrónica, se pueden considerar un camino razonable para ensamblar una amplia variedad de nanoobjetos que permitiría obtener circuitos con nuevas arquitecturas que reducirían significativamente los costes de producción en comparación con las actuales tecnologías de semiconductores, que están alcanzando su límite físico.<sup>4</sup>

### **Candidatos a Nanohilos**

Parece evidente que no es fácil encontrar candidatos a hilos conductores nanométricos. Se han estudiado una amplia variedad de moléculas como posibles candidatos, desde moléculas orgánicas basadas en cadenas alifáticas saturadas o sistemas aromáticos a sistemas más complejos como el ADN o los nanotubos de carbono.<sup>5</sup>

La mayor parte de los trabajos se han centrado en moléculas orgánicas, siendo todavía muy escasas las investigaciones con moléculas inorgánicas y en particular sistemas metal-orgánicos. La figura 1.2 resume las moléculas que se han estudiado como conductores moleculares hasta la fecha.



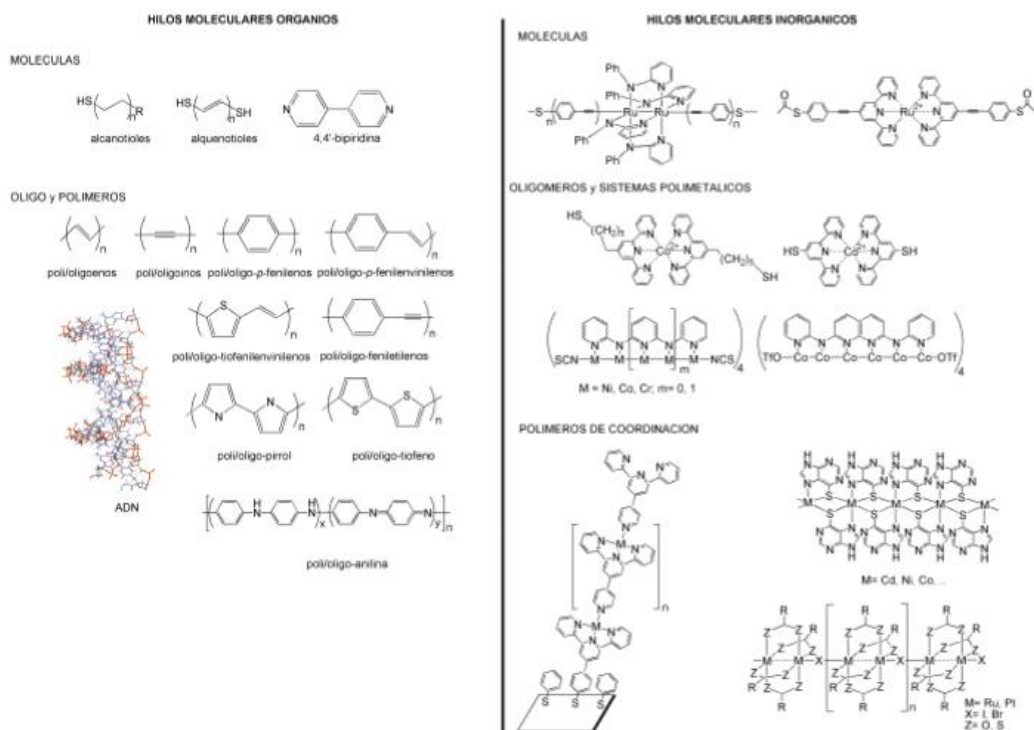


Figura 1.2. Distintos tipos de hilos moleculares orgánicos e inorgánicos estudiados.<sup>6</sup>

5 Ortiz, A.; Insuasty, B.; Illescas, B. M.; Martín, N. *An. Quím.* 2008, 104, 4, 270-275. 6 Mas-Ballesté, R.; Castillo, O.; Sanz Miguel, P. J.; Olea, D.; Gómez-Herrero, J.; Zamora, F. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2009 DOI: 10.1002/ejic.200801090.

Los nanohilos más estudiados actualmente son sistemas orgánicos oligoméricos que poseen como característica común una estructura electrónica deslocalizada, altamente conjugada, que permite la transferencia electrónica, como por ejemplo los sistemas basados en oligo-p-fenilvinileno<sup>7</sup> o en tetratrafalvaleno.<sup>8</sup> Un claro ejemplo de compuesto orgánico conductor procesado como una monocapa es el descrito recientemente por Bellec y col., que prepararon superficies de silicio unidas covalentemente a cadenas alquílicas terminadas en tetratrafalvaleno.<sup>9</sup> La conductividad de las moléculas orgánicas tiene el inconveniente de que es muy pobre, debido a que generalmente está dominada por un mecanismo localizado o de túnel:

$$I = I_0 \cdot e^{-\beta \cdot d} \quad (\beta: \text{factor de atenuación, } d: \text{longitud de la molécula}).$$

Los sistemas inorgánicos estudiados pueden clasificarse en (figura 1.2):

moléculas pequeñas,<sup>10</sup> oligómeros,<sup>11</sup> y polímeros de coordinación.<sup>12</sup> Algunos sistemas metal-orgánicos parecen mejorar la conductancia de las moléculas

orgánicas análogas,<sup>11</sup> por lo tanto una combinación adecuada de un metal con moléculas orgánicas para obtener hilos moleculares puede ser muy interesante.<sup>13</sup> Este hecho parece que puede estar relacionado con el

7 Davis, W. B.; Ratner, M. A.; Wasielewsky, M. R. *J. Am. Chem. Soc.* 2001, 123, 7877-7886. 8 Giacolone, F.; Segura, J. L.; Martín, N.; Guldi, D. M. *J. Am. Chem. Soc.* 2004, 126, 5340-5341. 9 Bellec, N.; Faucheux, A.; Hauquier, F.; Lorcy, D.; Fabre, B. *Int. J. Nanotechnol.* 2008, 5, 741-756. 10 (a) Chen, I. W. P.; Fu, M. D.; Tseng, W. H.; Yu, J. Y.; Wu, S. H.; Ku, C. J.; Chen, C. H.; Peng, S. M. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2006, 45, 5814-5818 (b) Mahapatro, A. K.; Ying, J. W.; Ren, T.; Janes, D. B. *Nano Lett.* 2008, 8, 2131-2136. 11 Tuccitto, N.; Ferri, V.; Cavazzini, M.; Quici, S.; Zhavnerko, G.; Licciardello, A.; Rampi, M. A. *Nat. Mater.* 2009, 8, 41-46. 12 Olea, D.; Alexandre, S. S.; Amo-Ochoa, P.; Guijarro, A.; de Jesus, F.; Soler, J. M.; de Pablo, P. J.; Zamora, F.; Gomez-Herrero, J. *Adv. Mater.* 2005, 17, 1761-1765. 13 Salomon, A.; Cahen, D.; Lindsay, S.; Tomfohr, J.; Engelkes, V. B.; Frisbie, C. D. *Adv. Mater.* 2003, 15, 1881-1890.

mecanismo de conducción que en alguno de estos casos deja de ser un mecanismo localizado.

Como se ha señalado antes, otros candidatos son los nanotubos de carbono, que destacan por sus propiedades conductoras.<sup>14</sup> Los nanotubos de carbono están formados conceptualmente por láminas de grafeno enrolladas sobre si mismas. Más que de una molécula se trata de un cristal unidimensional. La geometría de un nanotubo de carbono está definida por sus índices cristalográficos. Pese a sus excelentes propiedades conductoras y mecánicas, los nanotubos de carbono presentan dificultades en sus posibles aplicaciones como hilos moleculares. La síntesis y purificación de nanotubos de carbono son aspectos que presentan todavía importantes limitaciones para sus posteriores aplicaciones. Por otra parte, la funcionalización o modificación química de los nanotubos de carbono se encuentra todavía en fase de desarrollo y, ciertamente, está limitada por las características intrínsecas de los mismos, siendo este un aspecto esencial para el ensablaje de los nanotubos con la idea de formar nanocircuitos y nanomecanismos.

El ADN, por su habilidad para autoreconocerse y generar una amplia variedad estructural basada en el autoensablaje,<sup>15</sup> es a priori el sistema ideal para la construcción de nanocircuitos. Se conocen modelos autoensablados de ADN formando diversas estructuras geométricas similares a las que se recogen en la figura 1.3.

14 Dekker, C. *Phys. Today* 1999, 52, 22-28.

15 Seeman, N.C. *Angew. Chem.* 1998, 37, 3220-3238.

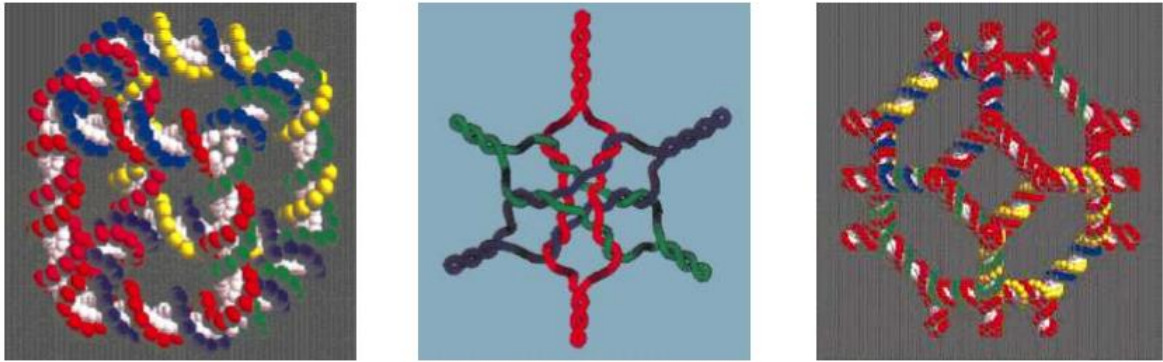


Figura 1.3. Varios modelos autoensamblados de ADN.<sup>15</sup>

Además, gracias a las enzimas, la secuencia de los pares de bases puede ser modificada con una precisión atómica. Sin embargo, los datos de las medidas directas de conducción que han sido realizadas en el ADN muestran resultados poco claros.<sup>16</sup> Por ejemplo hay estudios que concluyen que el B-ADN es un semiconductor<sup>17</sup> pero otros le atribuyen un comportamiento superconductor.<sup>18</sup> En una revisión de estos estudios, Richter concluye que la secuencia aleatoria del ADN es aislante, mientras que determinadas secuencias como la poli(dG)-poli(dC) pueden exhibir propiedades semiconductoras.<sup>19</sup> Con los estudios realizados hasta la fecha se puede concluir que el ADN de secuencia aleatoria se comporta como un aislante cuando presenta longitudes superiores a 30 nm.<sup>20</sup>

16 (a) Bockrath M.; Markovic N.; Shepard A.; Tinkham M.; Gurevich L.; Kouwenhoven L. P.; Wu M. S. W.; Sohn L. L. *Nano Lett.* 2002, 2, 187–90 (b) Gil A.; de Pablo P. J.; Colchero J.; Gomez-Herrero J.; Baro A. M. *Nanotechnology* 2002, 13, 309–313 (c) Gómez-Navarro C.; Moreno-Herrero F.; de Pablo P. J.; Colchero J.; Gómez-Herrero J.; Baro A. M. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 2002, 99, 8484-8487. 17 Rakitin, A.; Aich, P.; Papadopoulos, C.; Kobzar, Y.; Vedeneev, A. S.; Lee, J. S.; Xu, J. M. *Phys. Rev. Lett.* 2001, 86, 3670-3673. 18 Kasumov A. Y.; Kociak M.; Gueron S.; Reulet B.; Volkov V. T.; Klinov D. V.; Bouchiat H. *Science* 2001, 291, 280–282. 19 Richter J. *Physica E* 2003, 16, 157–173. 20 Nogues, C.; Cohen, S. R.; Daube, S. S.; Naaman, R. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2004, 6, 4459-4466.

Con la idea de mejorar las propiedades conductoras del ADN se han realizado diversas modificaciones de su estructura, como es la incorporación de centros metálicos en la doble hélice.<sup>21</sup> Estas aproximaciones en algunos casos implican la sustitución de una base normal por otra análoga coordinada con el objetivo de disponer de forma contigua varios átomos metálicos. Este tipo de experimentos suponen un descubrimiento muy significativo, pero tienen el gran inconveniente de que no permiten obtener estructuras largas.

Otra forma de insertar átomos metálicos dentro de la doble hélice es la formación del M-ADN<sup>22</sup> que se basa en la inserción de iones metálicos divalentes como  $Zn^{2+}$ ,  $Co^{2+}$  o  $Ni^{2+}$  entre los pares de bases, lo que normalmente se produce a altos valores de pH (ca. 8.5). En principio, el M-ADN se puede sintetizar a partir de cualquier secuencia y presenta interesantes propiedades físicas. La primera evidencia directa de las propiedades conductoras del M-ADN se tuvo en 2001, cuando Rakitin y col. midieron la conductividad de un haz de moléculas de 15  $\mu m$  de largo sostenido entre dos electrodos de oro.<sup>23</sup> Estos resultados demuestran que el M-ADN podría ser adecuado para innumerables aplicaciones nanotecnológicas pero tanto su estructura como sus propiedades siguen siendo muy discutidas.<sup>24</sup>

Recientemente, Moreno-Herrero y col. llevaron a cabo un estudio sobre la respuesta electrostática del M-ADN demostrando su naturaleza aislante.<sup>25</sup> Para ayudar a poner luz en este asunto es crucial conocer la estructura del M-ADN,

21 (a) Keren K.; Krueger M.; Gilad R.; Ben-Yoseph G.; Sivan U.; Braun E. *Science* 2002, 297, 72–75 (b) Mancin F.; Chin J. J. *Am. Chem. Soc.* 2002, 124, 10946–10947 (c) Atwell S.; Meggers E.; Spraggon G.; Schultz P. G. *J. Am. Chem. Soc.* 2001, 123, 12364–12367. 22 Lee, J. S.; Latimer, L. J. P.; Reid, R. S. *Biochem. Cell Biol.* 1993, 71, 162-168. 23 Rakitin, A.; Aich, P.; Papadopoulos, C.; Kobzar, Y.; Vedenev, A. S.; Lee, J. S.; Xu, J. M. *Phys. Rev. Lett.* 2001, 86, 3670-3673. 24 (a) Mizoguchi, K.; Tanaka, S.; Ogawa, T.; Shiobara, N.; Sakamoto, H. *Phys. Rev. B* 2005, 72, 033106-1-033106-4 (b) Di Felice, R.; Calzolari, A.; Zhang, H. *Nanotechnology* 2004, 15, 1256-1263. 25 Moreno-Herrero, F.; Herrero, P.; Moreno, F.; Colchero, J.; Gómez-Navarro, C.; Gómez-Herrero, J.; Baró, A. M. *Nanotechnology* 2003, 14, 128-133.

pero todavía no se han conseguido llevar a cabo estudios de rayos X ni de RMN adecuados para su caracterización. Tampoco se ha llegado a proponer un modelo teórico definitivo.<sup>26</sup>

### **Química Supramolecular**

Una de las herramientas en las técnicas denominadas de abajo a arriba (“bottom-up”) se basa en la Química Supramolecular, que se encarga de estudiar la química que va más allá de las propias moléculas. El Prof. J. M. Lehn, artífice del concepto de la Química Supramolecular, sugiere un amplio abanico de posibilidades que van más allá de la propia molécula.<sup>27</sup> La Química Supramolecular consiste en el autoensamblaje espontáneo de moléculas orgánicas e inorgánicas que se reconocen unas a otras mediante distintos tipos de interacciones y puede dar lugar a estructuras con propiedades no existentes en los componentes individuales. Para la Química Supramolecular resulta esencial la naturaleza de las fuerzas intermoleculares, que consisten en interacciones no covalentes entre moléculas discretas.

Las interacciones no covalentes juegan un papel crítico en el mundo de la Biología. Mediante el uso adecuado de unos pocos bloques de construcción, las cadenas de ácidos nucleicos pueden almacenar cantidades ingentes de información que puede ser leída, copiada o almacenada. Del mismo modo, una gran variedad de moléculas pueden ser reconocidas por proteínas. La Química Supramolecular aplica estos principios mediante la manipulación de enlaces de hidrógeno, fuerzas de van der Waals y fuerzas electrostáticas, permitiendo explorar distintos modelos de interacción.

26 Fuentes-Cabrera, M.; Sumpster, B. G.; Sponer, J. E.; Sponer, J.; Petit, L.; Wells, J. C. J. *Phys. Chem B* 2007, 111, 870-879.

27 Lehn J. M. *Science* 1996, 260, 1762-1763.

Otro aspecto de interés en la Química Supramolecular es la denominada Química Supramolecular de Coordinación en la que los bloques de construcción establecen uniones basadas en enlaces de coordinación. A lo largo de los últimos años, el uso de iones metálicos y determinados ligandos orgánicos se ha mostrado muy útil en el diseño de nuevas moléculas de determinadas formas regulares y de tamaños que alcanzan con facilidad la escala nanométrica (1 nm a 1  $\mu\text{m}$ ). La formación de supramoléculas basadas en enlaces de coordinación permite la obtención de sistemas finitos e infinitos que se basan en el autoensamblaje de distintos bloques de construcción.

### **Polímeros de Coordinación**

Dentro de las entidades supramoleculares destacan los polímeros de coordinación, que son cadenas infinitas obtenidas mediante el autoensamblaje de iones metálicos y ligandos orgánicos unidos por enlaces de coordinación.<sup>28</sup>

La clave para diseñar polímeros con la arquitectura adecuada está en la selección de sus bloques de construcción (cationes o complejos metálicos y ligandos), así como en la naturaleza de las interacciones que se establecen entre ellos, lo cual determina las propiedades de los materiales resultantes.

La correcta selección del ión metálico, de los ligandos empleados y de las propiedades de coordinación de ambos permite un diseño racional de los polímeros de coordinación y, por tanto, de sus propiedades físicas y químicas.

En los últimos años, la investigación en polímeros de coordinación ha crecido exponencialmente.<sup>29</sup> Estos compuestos representan una nueva y activa área de

28 Kitagawa, S. N. S. In *Comprehensive Coordination Chemistry II*, ed. T. J. McCleverty. Vol. 7. 2004, Amsterdam: Elsevier. 29 (a) Zaworotko, M. J. *Chem. Comm.* 2001, 1, 1-9 (b) Munakata, M.; Wu, L. P.; Kuroda-Sowa, T. *Adv. Inorg. Chem.* 1998, 46, 173-303 (c) Kitagawa, H.; Onodera, N.; Sonoyama, T. *J. Am. Chem. Soc.* 1999, 121, 43, 10068-10080 (d)

la Química de Coordinación debido a su papel especial en materiales magnéticos, ópticos, catálisis, etc.<sup>30</sup>

Algunas de las propiedades destacadas en estos polímeros son:

- (i) El autoensamblaje, que consiste en la unión selectiva de los iones metálicos con determinados átomos dadores de los ligandos orgánicos para formar monómeros, dímeros o polímeros.
- (ii) La autoorganización, que es un proceso de atracción y repulsión en el que la organización interna de un sistema, normalmente un sistema abierto, aumenta en complejidad sin necesidad de ser dirigido por ninguna fuerza externa.
- (iii) La reversibilidad, que es una propiedad que presenta el enlace de coordinación, que permite recuperar los polímeros de coordinación iniciales tras su rotura o escisión en un proceso provocado por aplicación de energía.

Los polímeros de coordinación son compuestos que se extienden infinitamente en una, dos o tres dimensiones mediante enlaces de coordinación entre los metales y los ligandos que actúan de puente. Los ligandos puente pueden ser de tipo inorgánico, como por ejemplo los halogenuros, OH<sup>-</sup> o N<sub>3</sub><sup>-</sup>, o de tipo orgánico, como las pirazinas o las 4,4'-bipiridinas.

La estrategia más común que se puede aplicar en el diseño de polímeros de coordinación es generar un sistema que sea una simple extensión de un metal de transición o un agregado metálico.<sup>31</sup>

Eddaoudi, M.; Kim, J.; Vodak, D.; Sudik, A.; Wachter, J.; O'Keeffe, M.; Yaghi, O. M. *P. Natl. Acad. Sci. USA* 2002, 99, 8, 4900-4904.

30 (a) Kitagawa, S. N. S. In *Comprehensive Coordination Chemistry II*, ed. T. J. McCleverty. Vol. 7. 2004, Amsterdam: Elsevier (b) Janiak, C. *Dalton Trans.* 2003, 14, 2781-2804. 31 Power, K. N.; Hennigar, T. L.; Zaworotko, M. J. *New J. Chem.* 1998, 22, 177-182.

Muchos polímeros de coordinación se forman mediante procesos aleatorios, pero los investigadores buscan cada vez más un diseño racional aprovechando las características geométricas y cinéticas de los centros metálicos y de los ligandos. Es decir, se ha llegado al estadio en el que es posible diseñar y seleccionar fragmentos específicos y autoensamblarlos para conseguir una topología determinada. Mediante el autoensamblaje de ligandos orgánicos polifuncionales rígidos con cationes metálicos de geometría predeterminada se puede predecir la estructura final de la red. Debido a las diferentes conectividades y geometrías de los distintos centros metálicos, la elección de éste dicta la arquitectura resultante. Por ejemplo, escogiendo un complejo con dos ligandos bidentados lineales colocados a 180° será fácil conseguir un autoensamblaje monodimensional, con tres ligandos con estructura plano-trigonal será posible conseguir un ensamblaje bidimensional y con cuatro ligandos dirigidos hacia los vértices de un tetraedro se podrá obtener una estructura tridimensional (figura 1.4). Sin embargo, el uso de ligandos tri, tetra o polidentados permiten la obtención de arquitecturas más complicadas. La influencia sobre la estructura final de diferentes aniones/cationes

es muy importante y ha sido estudiada extensamente. Por ejemplo, la reacción entre la etilendiaminatetrapropionitrilo y  $\text{AgNO}_3$ ,  $\text{Ag}(\text{CF}_3\text{SO}_3)$  o  $\text{AgClO}_4$  conduce a la formación de una cadena monodimensional, una red bidimensional o una estructura tipo caja respectivamente.<sup>32</sup>

32 Min, K. S.; Suh, M. P. J. Am. Chem. Soc. 2000, 122, 6834-6840.

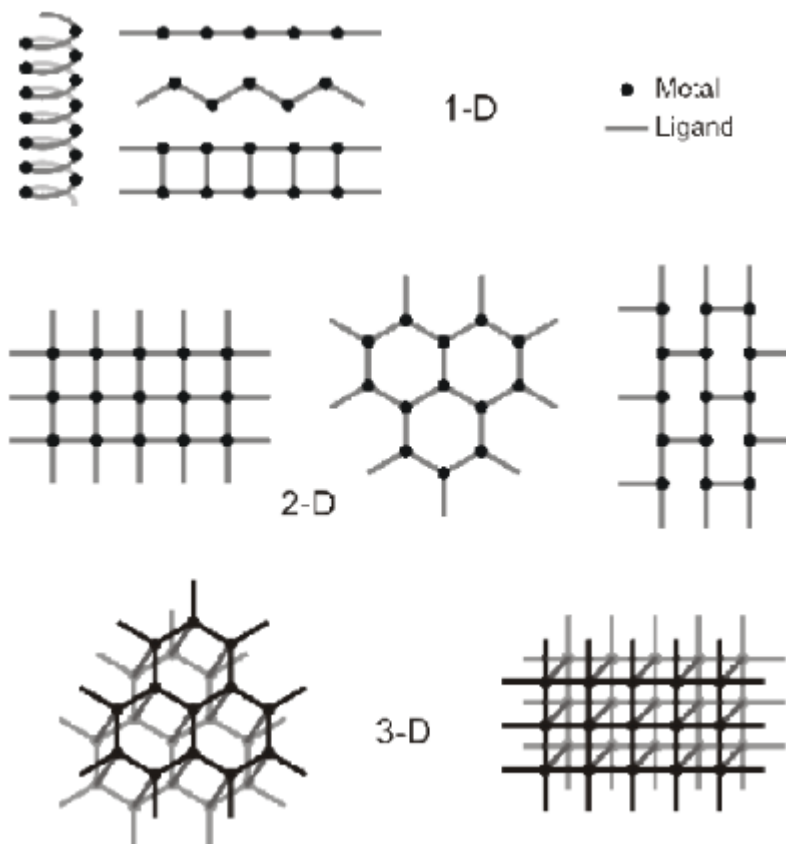


Figura 1.4. Diversas arquitecturas derivadas de supramoléculas de coordinación.<sup>33</sup>

En algunas ocasiones hay complejos que pueden actuar como ligandos. Esto ocurre cuando el ión metálico está unido a grupos con capacidad dadora para unirse a otro centro metálico. Es lo que se conoce como síntesis dirigida. La síntesis por bloques consiste en el autoensamblaje de complejos que presentan posiciones libres o lábiles mediante ligandos especiales. En este caso el complejo de partida actúa como un ion metálico.

Si el ligando que une los bloques es también un complejo de coordinación, tendremos el caso general de síntesis por bloques a través de la estrategia “complejos como ligandos/complejos como metales”.<sup>34</sup>

33 Sanz Miguel, P.J.; Amo-Ochoa, P.; Castillo, O.; Houlton, A.; Zamora F. Metal Complexes - DNA interactions (E. Sletten, N. Hadjiliadis, Eds.), Cap. 4. Blackwell

Publishing, Oxford, UK., 2009. 34 Ribas, J. "Coordination Chemistry" Ed. Wiley-VCH 2008.

No existen muchos ejemplos de polímeros de coordinación que se comporten como conductores eléctricos,<sup>35</sup> si bien recientemente el estudio de las propiedades eléctricas de estos compuestos ha despertado un nuevo interés.<sup>36</sup> Sin embargo, son bien conocidas las propiedades eléctricas de ciertos sistemas que implican compuestos de coordinación en los que existe interacción metal-metal. Por ejemplo, los CPK, que son sistemas formados por el apilamiento de complejos plano cuadrados de platino. En estos compuestos, de naturaleza aniónica, los centros metálicos están coordinados a iones cianuro.<sup>37</sup> Por otra parte, se encuentran los polímeros MX, que pueden ser homo y heterometálicos. Han resultado de especial interés, desde el punto de vista de sus propiedades eléctricas, los formados por Pt(II)-Pt(IV).<sup>38</sup> Una variación de estos sistemas monodimensionales son los polímeros denominados MMX, que consisten en cadenas pseudomonodimensionales formadas por unidades dimetálicas conteniendo carboxilatos o ditiocarboxilatos como puentes entre metales y con puentes halógeno conectando las unidades dimetálicas.<sup>39</sup> En particular, los MMX de platino con ligandos ditioacetato son de gran interés tecnológico por las inusuales propiedades eléctricas que presentan, dado que se comportan, en fase sólida, como conductores metálicos a temperatura ambiente. Sin embargo, no se conocen estudios de caracterización eléctrica de estos sistemas a nivel molecular.

35 (a) Kitagawa, S. N. S. In *Comprehensive Coordination Chemistry II*, ed. T. J. McCleverty. Vol. 7. 2004, Amsterdam: Elsevier (b) Janiak, C. *Dalton Trans.* 2003, 14, 2781-2804. 36 (a) Mateo-Martí, E.; Welte, L.; Amo-Ochoa, P.; Sanz Miguel, P. J.; Gómez-Herrero, J.; Martín-Gago, J. A.; Zamora, F. *Chem. Comm.* 2008, 945-947. (b) Delgado, S.; Sanz Miguel, P. J.; Priego, J. L.; Jiménez-Aparicio, R.; Gómez-García, C. J.; Zamora, F. *Inorg. Chem.* 2008, 47, 9128-9130. 37 Williams, M. *Adv. Inorg. Chem. Radiochem.* 1983, 26, 235-268. 38 Tanino, H.; Kobayashi, K. *J. Phys. Soc. Jap.* 1983, 52, 1446-1456. 39 (a) Kitagawa, H.; Onodera, N.; Ahn, J. S.; Mitani, T. *Synthetic Metals* 1997, 86, 1931-1932 (b) Mitsumi, M.; Umebayashi, S.; Ozawa, Y.; Toriumi, K.; Kitagawa, H.; Mitani, T. *Chemistry Letters* 2002, 258-259.

Para que una molécula pueda ser considerada como candidata a hilo molecular es necesario realizar la caracterización de las propiedades eléctricas de esa molécula como entidad individual.<sup>40</sup> Un método adecuado para realizar ese estudio consiste en aislar el sistema en una superficie y realizar su caracterización morfológica y eléctrica mediante Microscopía de Fuerzas Atómicas (AFM) en geometría horizontal.<sup>41</sup> Por lo tanto, en nuestro caso, se hace necesario buscar métodos que permitan organizar en superficie polímeros de coordinación para posteriormente realizar su caracterización morfológica y eléctrica. Debido a que en este trabajo se han realizado múltiples medidas con un microscopio de fuerzas atómicas, en el apéndice se dan detalles de esta técnica.



La aplicación de los polímeros de coordinación en muchos casos está restringida por su limitada procesabilidad como consecuencia de su baja solubilidad, rápida degradación en disolución y, en algunos casos, por su descomposición.<sup>42</sup> Estas características hacen muy difícil procesar estos materiales como películas, fibras u otras formas adecuadas en la búsqueda de aplicaciones tecnológicas lo cual implica que las estrategias experimentales para aislar polímeros de coordinación no son nada obvias.

Se conocen muy pocos sistemas inorgánicos depositados en superficie. Lehn y col. obtuvieron hace tan sólo una década el primer compuesto de coordinación depositado en superficie.<sup>43</sup> Observaron mediante Microscopía de Efecto Túnel (STM) la formación espontánea de una monocapa ordenada de moléculas de

40 Ulgut, B.; Abruña, H. D. *Chem. Rev.* 2008, 108, 2721–2736. 41 Mas-Ballesté, R.; Castillo, O.; Sanz Miguel, P. J.; Olea, D.; Gómez-Herrero, J.; Zamora, F. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2009 DOI: 10.1002/ejic.200801090. 42 Janiak, C. *Dalton Trans.* 2003, 14, 2781-2804. 43 Semenov, A.; Spatz, J. P.; Moller, M.; Lehn, J. M.; Sell, B.; Schubert, D.; Weidl, C. H.; Schubert, U. S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 1999, 38, 2547-2550.

Co<sub>4</sub>(L)<sub>4</sub>[(PF<sub>6</sub>)<sub>8</sub>] a partir de una disolución. Este trabajo abrió una nueva línea de investigación que han seguido varios científicos. Posteriormente se han desarrollado nuevos métodos de adsorción, como es el caso del polímero bidimensional de coordinación procesado en superficie por Stepanow y col.<sup>44</sup> Consiguieron sublimar Fe<sup>0</sup> y distintos tipos de ácidos carboxílicos formando una red caracterizada mediante STM (figura 1.5). En estos casos las técnicas de adsorción empleadas son extremadamente complejas, requieren el uso de sistemas de ultraalto vacío con múltiples evaporadores y sus aplicaciones podrían estar condicionadas a la estabilidad de la organización en condiciones ambientales. Antes del inicio de esta investigación solamente se habían descrito dos ejemplos de polímeros de coordinación procesados como nanofibras mediante “electrospinning”, que son obtenidas por agregación de varias moléculas poliméricas y caracterizadas mediante SEM (Microscopía Electrónica de Barrido), pero en estos casos las fibras obtenidas eran de diámetros de varios cientos de nanómetros.<sup>45</sup> Hasta la realización de este trabajo no se había logrado la adsorción y caracterización de cadenas aisladas de polímeros de coordinación monodimensionales en superficie. Sin embargo, simultáneamente a la publicación de los primeros resultados de esta Tesis, Novokmet y col. consiguieron también aislar y caracterizar mediante STM al aire, moléculas de un polímero lineal de coordinación de Zn(II) en superficie.<sup>46</sup>

44 Stepanov, S.; Lingenfelder, M.; Dmitriev, A.; Spillmann, H.; Delvigne, E.; Lin, N.; Deng, X.; Cai, C.; Barth, J. V.; Kern, K. *Nature Mat.* 2004, 3, 4, 229-233. 45 (a) Lu, J. Y.; Norman, C.; Abboud, K. A.; Ison, A. *Inorg. Chem. Comm.* 2001, 4, 9, 459-

461 (b) Lu, J. Y.; Runnels, K. A.; Norman, C. *Inorg. Chem.* 2001, 40, 18, 4516-4517. 46 Novokmet, S.; Alam, M. S.; Dremov, V.; Heinemann, F. W.; Mueller, P.; Alsfasser, R. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005, 44, 5, 803-806.

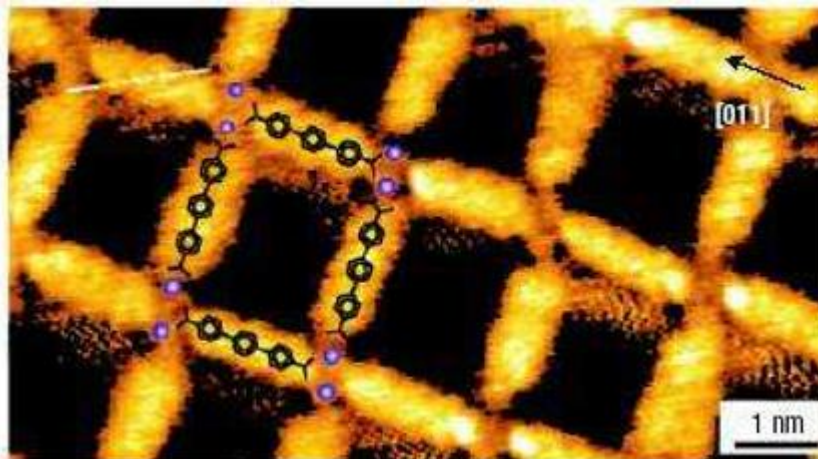


Figura 1.5. Imagen de STM de la red bidimensional depositada en superficie por Stepanov y col.

Recientemente, Surin y col. han aislado sobre grafito sistemas monodimensionales de Pd(II) que han sido estudiados mediante STM, obteniendo arquitecturas mono o bidimensionales selectivamente (figura 1.6).<sup>47</sup> Previsiblemente, el número de publicaciones de este tipo irá en aumento ya que numerosos investigadores han focalizado su atención en las aplicaciones nanoelectrónicas de esta variedad de compuestos.

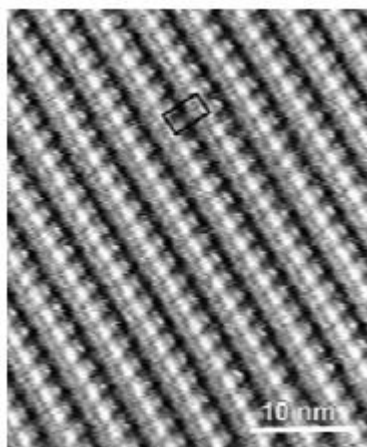


Figura 1.6. Empaquetamiento paralelo de cadenas monodimensionales de Pd(II) depositada sobre grafito por Surin y col.

<sup>47</sup> Surin, M.; Samori, P.; Jouaiti, A.; Kyritsakas, N.; Hosseini, M. W. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 245-249.

**El objetivo principal** de este trabajo es la obtención de hilos moleculares basados en polímeros de coordinación. Para ello surge la necesidad de: (i)

diseñar, sintetizar y caracterizar nuevos compuestos, (ii) encontrar métodos sistemáticos de adsorción de polímeros de coordinación en superficie, y (iii) caracterizar morfológica y eléctricamente estos sistemas una vez aislados en superficie. El objetivo final, no en el horizonte de esta Tesis, será el uso de estos sistemas como componentes en la fabricación de nanocircuitos.

**objetivos específicos:**

1. Seleccionar sistemas monodimensionales que resulten candidatos adecuados a comportarse como conductores eléctricos. Para ello se hará uso de medidas experimentales y cálculos teóricos.
2. Sintetizar y caracterizar los bloques de construcción apropiados para la construcción de los sistemas poliméricos.
3. Preparar, caracterizar y estudiar diversas condiciones de síntesis que conduzcan a la obtención de los sistemas monodimensionales poliméricos.
4. Desarrollar métodos sistemáticos de adsorción y organización de los polímeros en superficie adecuados para la caracterización morfológica y eléctrica de cadenas individuales.
5. Caracterizar morfológica y eléctricamente los sistemas monodimensionales aislados en superficie, para lo que se hará uso de la Microscopía de Fuerzas Atómicas

**Discusión de resultados**

Compuestos con 6-Mercaptopurina y 6-Tioguanina

Introducción

La motivación inicial de este trabajo fue la de aportar una aproximación química que permitiese ahondar a la controversia sobre las propiedades eléctricas del M-ADN anteriormente señaladas. Para ello se seleccionó un sistema que guardase cierta relación con la estructura inicialmente propuesta por Lee para el M-ADN.<sup>48</sup> Por esto, se eligió el polímero de coordinación monodimensional  $[Cd(6-MP-)_2 \cdot 2H_2O]_n$  (compuesto 4) cuya estructura<sup>49</sup> presenta las siguientes características:

- (i) Una distancia metal-metal corta, que podría facilitar posibles interacciones intermetálicas, semejante a lo que sucedería en los cationes metálicos dispuestos en el M-ADN según la estructura propuesta por Lee.
- (ii) La posición de las bases nitrogenadas tiopurínicas entre las que se produce apilamiento (figura 2.1). El apilamiento es definido como el solapamiento parcial o

aproximación muy cercana de bases paralelas o casi paralelas. El apilamiento es otra característica que se mantiene en la estructura del M-ADN sugerida por Lee.

48 Lee, J. S.; Latimer, L. J. P.; Reid, R. S. *Biochem. Cell Biol.* 1993, 71, 162-168.

49 Dubler E.; Gyr E. *Inorg. Chem.* 1988, 27, 8, 1466-1473.

(iii) Los cationes metálicos se localizan entre los pares de bases enlazándolos, como sucedería en el caso de la estructura del M-ADN propuesta por Lee.

Nuestro objetivo se centró en la obtención de cadenas individuales de este polímero en superficie para realizar su caracterización morfológica y eléctrica mediante AFM. Para abordar posibles vías de adsorción en superficie, nos planteamos realizar un estudio completo de las posibles rutas sintéticas que pudiesen conducir a la formación del compuesto 4.

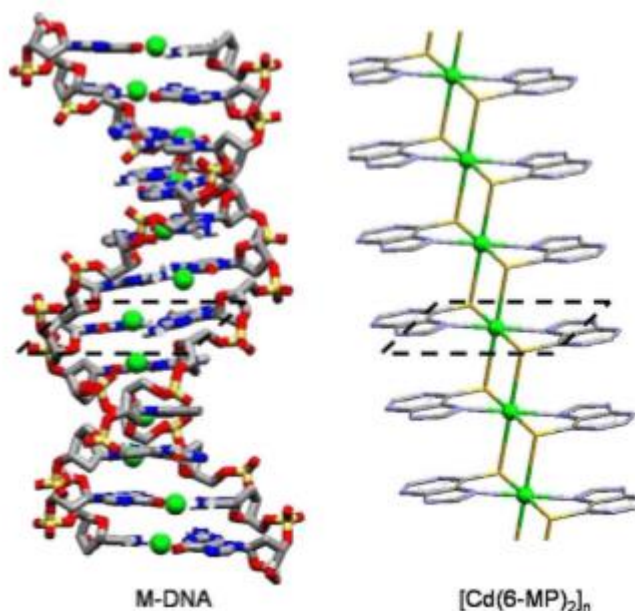


Figura 2.1. En esta figura se pueden observar las similitudes estructurales entre el M-ADN y el compuesto 4.50

En nuestro caso, los ligandos utilizados para preparar los polímeros de coordinación con cierta analogía estructural al M-ADN son dos nucleobases

50 Zamora, F.; Amo-Ochoa, P.; Sanz Miguel, P. J.; Castillo, O. *Inorg. Chem. Acta* 2009, 362, 691-706.

artificiales: 6-mercaptipurina (figura 2.2a) y 6-tioguanina (figura 2.2b). La 6-mercaptipurina es una nucleobase púrica sintética que se puede considerar como el análogo azufrado de la hipoxantina. La 6-tioguanina se obtiene mediante la

sustitución del oxígeno de la posición 6 de la guanina por un azufre. Ambas se emplean para el tratamiento de la leucemia en humanos.



Figura 2.2. (a) Estructura de la 6-mercaptopurina y (b) de la 6-tioguanina. A pesar de la versatilidad de los modos de coordinación de las 6-tiopurinas, sólo se conocen unas pocas estructuras resueltas por difracción de rayos-X de complejos conteniendo estos ligandos. La mayoría consisten en complejos monoméricos aunque también los hay diméricos.<sup>51</sup> En la figura 2.3 se recogen los distintos modos de coordinación descritos para las 6-tiopurinas. En contraste con las 6-oxopurinas, donde la quelación de un metal a través de las posiciones O(6)/N(7) se produce en raras ocasiones, en el caso de las 6tiopurinas la coordinación a los átomos S(6) y N(7) para formar un anillo de quelato es relativamente fácil.<sup>52</sup> Dependiendo del catión metálico con el que se

<sup>51</sup> Dubler, E. *Metal Ions in Biological Systems*; Sigel, A, Sigel, S., Eds.; Marcel Dekker: New York, 1996, 32, 301-338. <sup>52</sup> Heitner H. I.; Lippard S. J. *Inorg. Chem.* 1974, 13, 4, 815-822

coordine, el uso de nucleobases azufradas puede ser muy ventajoso para formar polímeros lineales.

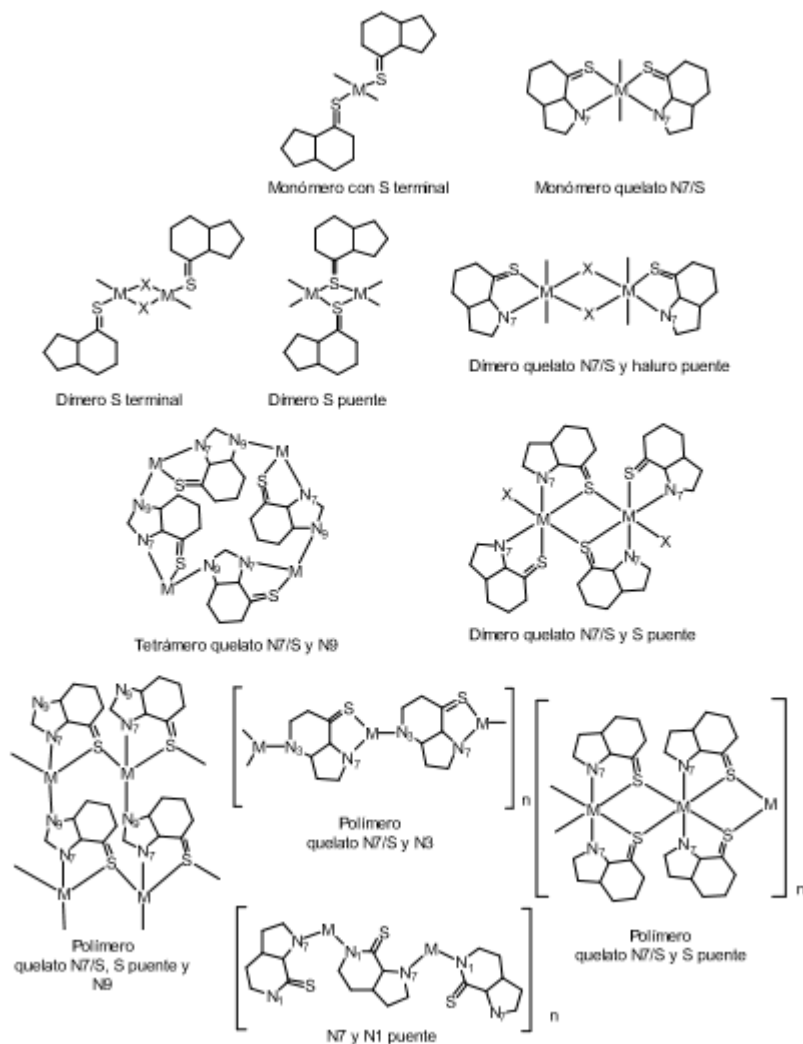


Figura 2.3. Modos de coordinación de las 6-tiopurinas.<sup>53</sup>

Es interesante señalar que una de las ventajas de usar nucleobases como ligandos radica en que éstas poseen átomos adecuados para actuar como dadores y aceptores en la formación de enlaces de hidrógeno, lo que facilitaría posibles interacciones con otras moléculas, incluyendo biomoléculas como el ADN.<sup>54</sup>

53 Castillo, O; Luque, A.; García-Terán, J. P.; Amo-Ochoa, P. *Inorganic Supramolecular Assemblies* (vol 9), Ed. WileyBlackwell, 2009

POLÍMEROS MONODIMENSIONALES (1D) CONDUCTORES CANDIDATOS A HILOS MOLECULARES. ESTADO DEL ARTE

Entre otras nanoestructuras, los materiales monodimensionales han dado lugar a grandes expectativas debido, entre otras características, a sus excepcionales propiedades de transporte eléctrico<sup>25</sup>.

Una de las aplicaciones más relevantes de los nanomateriales 1D se basa en su potencial uso como hilos o cables moleculares que conduzcan la electricidad, o como interconectores para la construcción de circuitos electrónicos <sup>26</sup> . Así, mientras que los hilos moleculares semiconductores presentan un gran potencial como nanocomponentes de transistores, los hilos de moléculas metálicas poseen gran interés como cables e interconectores. Otra utilidad de estos materiales se encuentra en la emergente tecnología de electrónica transparente y flexible<sup>27</sup>.

Idealmente, un hilo molecular es una molécula de gran longitud que debe cumplir dos requisitos básicos:

- 1) Transportar carga con una razonable baja resistencia a lo largo de largas distancias.
- 2) Tener capacidades estructurales basadas en el auto-ensamblado de sus bloques de construcción, para permitir la formación de dispositivos complejos.
- 3) Sin embargo, mientras que la segunda condición se encuentra en ciertos sistemas moleculares, la primera impone serias restricciones en el tipo de moléculas.
- 4) Así, inicialmente los polímeros orgánicos conjugados fueron posicionados como los mejores candidatos, siendo ampliamente estudiados para este propósito<sup>28</sup>. Aunque se ha alcanzado una notable mejora en lo referido a su procesamiento<sup>29</sup>, los mecanismos localizados de transporte de carga y la limitada conductividad encontrada en las fibras de estos polímeros, donde la resistencia resulta extremadamente alta para longitudes de unos pocos nanómetros (figura 3.3), son todavía un asunto controvertido que ha generado mucha discusión<sup>30</sup>. Estas estructuras presentan características típicas de materiales desordenados, donde el transporte de carga está descrito en términos de islas metálicas rodeadas de regiones desordenadas que actúan como barreras<sup>31</sup>.

Figura 3.3. Representación en escala semilogarítmica de la resistencia eléctrica caracterizada para hilos moleculares de polímeros orgánicos conjugados (oligofenileniminas) de distinta longitud de cadena <sup>30b</sup>. En la gráfica puede observarse el elevado valor que adquiere la resistencia eléctrica en las cortas distancias caracterizadas (3-7 nm), así como su aumento exponencial con la longitud.

En la década de los noventa, esta cuestión pareció solucionarse con la aparición de los nanotubos de carbono<sup>32</sup>, cilindros cristalinos basados únicamente en carbono

que exhibían unas conductividades sin precedentes. Sin embargo, aunque los primeros estudios mostraron resultados muy prometedores<sup>33</sup>, los defectos generados a escala atómica han resultado ejercer una tremenda influencia sobre su conductividad<sup>34</sup>. Estas nanoestructuras han servido como sistema modelo para ayudar a entender el transporte unidimensional y en particular el papel que desempeñan los defectos sobre la resistencia eléctrica de los materiales

monodimensionales, aunque la falta de un procedimiento barato y masivo para la producción de nanotubos con una quiralidad controlada y bajo contenido en defectos, unido a su difícil funcionalización química, ha limitado su aplicabilidad como hilo molecular<sup>35</sup>.

Más recientemente, las nanoestructuras basadas en compuestos metal-orgánicos se han propuesto como una alternativa viable y prometedora<sup>36</sup>. Estos sistemas permiten un diseño racional de materiales a través del auto-ensamblaje de sus bloques de construcción, previamente seleccionados<sup>37</sup>. Sin embargo, las conductividades<sup>38</sup> alcanzadas hasta la fecha para las nanoestructuras derivadas de estos compuestos metal-orgánicos (aún siendo de magnitud superior) están limitadas como en el caso de los polímeros orgánicos, por el desorden estructural.

Por tanto, el desafío de superar estas bajas conductividades y aclarar el mecanismo de transporte que rige la conducción eléctrica, se basa tanto en la producción de nanoestructuras bien ordenadas (mediante la comprensión de los procesos que rigen su auto-ensamblado) como en la posibilidad de acceder y caracterizar sus propiedades eléctricas por debajo de la longitud donde el desorden tiene un papel relevante (obteniendo así la conductividad intrínseca del material, libre de defectos).

Con este objetivo, este trabajo se ha centrado en el estudio del polímero MMX [Pt<sub>2</sub>I(S<sub>2</sub>CCH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>]<sub>n</sub>. En esta investigación, se ha conseguido obtener nanoestructuras metal-orgánicas mono dimensionales altamente ordenadas, siendo capaces de dar respuesta simultáneamente a estos dos hitos (apartado 3.3).