



El conocimiento humano vive una aceleración histórica sin precedentes, que tiene como motor un conjunto de tecnologías capaces de almacenar, intercambiar y procesar cantidades ingentes de información a una velocidad inimaginable hace apenas unos años. Ese ritmo vertiginoso provoca que el mundo y sus individuos se reinventen de manera profunda y constante. Nada de esto hubiera sido posible sin la química. La “sociedad líquida”, como la bautizó el sociólogo Zygmunt Bauman, no sería la seña de nuestro tiempo sin los nuevos materiales, que con sus propiedades posibilitan el desarrollo de aplicaciones sorprendentes. Pero ese enriquecimiento es mutuo, pues la química también ha cambiado gracias al influjo de las tecnologías de la información y la comunicación, como refleja la concesión del Premio Nobel de Química de 2013 a los *padres* de los programas informáticos que simulan la complejidad de los procesos químicos. | Lorena Cabeza y Andrea Jiménez / DIVULGA

■ Grafeno, la historia de un imposible | **PÁG. 17**

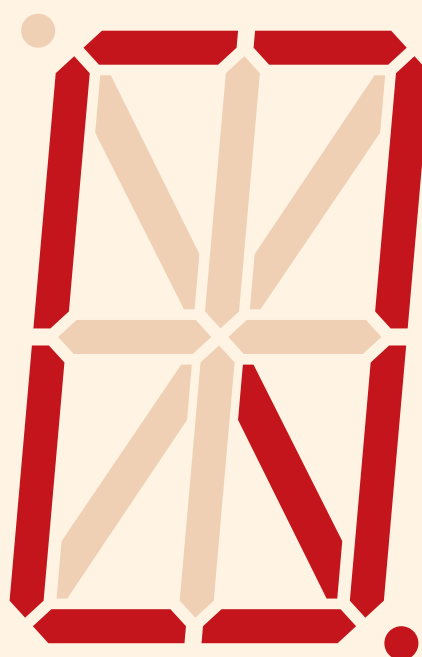
■ Feliu Maseras, investigador del ICIQ: “Necesitamos que los departamentos de investigación de las empresas confíen más en la química computacional para explorar posibles colaboraciones” | **PÁG. 18**

■ Helena Herrero, presidenta de HP para España y Portugal: “Somos líderes en áreas como la impresión, donde la química es imprescindible” | **PÁG. 23**



La simbiosis entre la química  
y las TIC marca el desarrollo  
de la sociedad del futuro

## La química de la información



Twitter, Facebook, las noticias en el teléfono móvil, el correo electrónico, videoconferencias en tiempo real desde el otro extremo del globo... La información fluye veloz ante nuestros ojos en unas pantallas del grosor de una tarjeta de crédito, cuya existencia damos por descontada pero que, en realidad, no habría sido posible sin el concurso de la investigación química, tanto básica como aplicada. Fue a finales del siglo XIX cuando el austriaco Friedrich Reinitzer y el alemán Otto Lehmann descubrieron los cristales líquidos, un hallazgo sin mayores consecuencias prácticas durante más de ochenta años. En todo ese tiempo alguien podría haber dicho, sin que nadie le rebatiera, que aquello no tenía la más mínima utilidad. A finales de los sesenta, sin embargo, el Gobierno del Reino Unido decidió invertir en la investigación de estos materiales, debido a los elevados costes de las pantallas de rayos catódicos empleadas en los televisores. Los cristales líquidos ya eran conocidos, pero su punto de fusión era demasiado alto como para ser utilizados a gran escala. En 1973, poco después del apoyo gubernamental a su proyecto, George Gray, químico escocés fallecido el pasado mes de mayo, consiguió crear un mate-

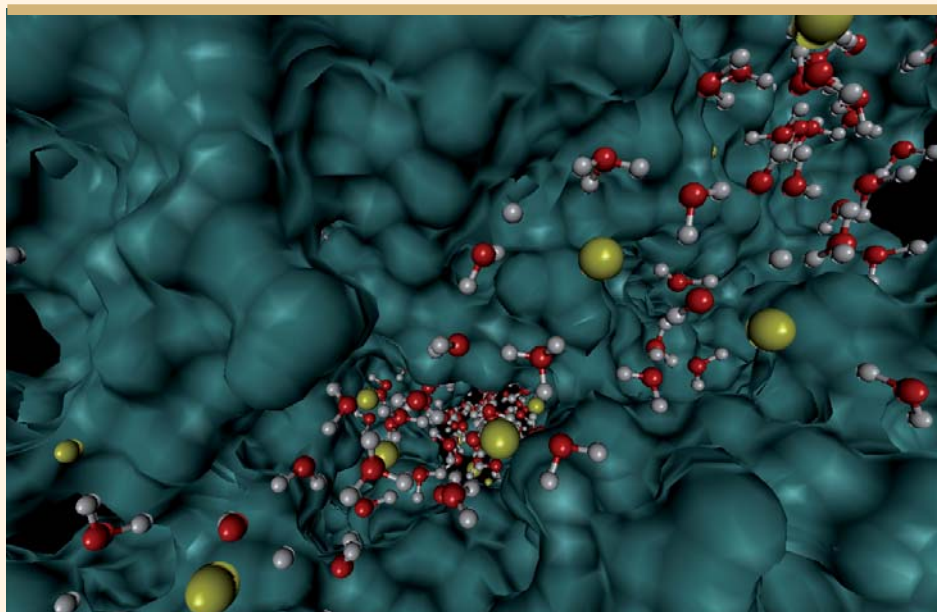
rial que se comportaba como un cristal líquido a temperatura ambiente, justo lo que necesitaba la industria para fabricar las finísimas pantallas que hoy todos manejamos día y noche, sin apenas reparar en que lo que tenemos entre las manos, encerrado entre dos vidrios, es un cuarto estado de la materia, a caballo entre la rigidez del sólido y la fluidez del líquido.

La información, que no es sino el reflejo inexacto de los intentos de nuestra mente por categorizar la realidad, se transforma a golpes de teclado en una imagen en la pantalla de nuestro ordenador, en signos garabateados en un papel o en un tuit lanzado a la red global. Química, en última instancia. De la química del cerebro a la química de los artilugios que consiguen copiar, almacenar, transferir, procesar y compartir la información que generamos, pues no en vano hablamos de materiales: el universo virtual hunde sus raíces en un mundo muy real, donde la tecnología se basa en nuevos compuestos alumbrados por la química —junto con la física o la ingeniería—. Y la relación no acaba ahí, ya que se retroalimenta: la misma ciencia química ha multiplicado su velocidad de desarrollo gracias a las tecnologías de la información y la comunicación (TIC). En ▶

▶ palabras de Miguel Ángel Alario, expresidente de la Real Academia de Ciencias y catedrático de Química Inorgánica de la Universidad Complutense de Madrid (UCM), “Internet nos ha cambiado la vida a todos. La red y los medios de comunicación han facilitado tanto la difusión del conocimiento como la comunicación entre unos químicos y otros, dando lugar a un desarrollo asombroso de nuestra disciplina”.

Las aportaciones de esta rama científica al crecimiento de las TIC han sido innumerables. José Antonio Alonso trabaja como profesor de Investigación en el Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), y ha colaborado con John B. Goodenough, el *padre* de los sistemas de baterías recargables de litio. En su opinión, “la química ha sido vital en el perfeccionamiento de las TIC tal y como las conocemos hoy”. Como explica Ernesto Castañeda, presidente de ANQUE y catedrático en el departamento de Tecnologías Especiales Aplicadas a la Telecomunicación en la Universidad Politécnica de Madrid, “es necesario disponer de materiales que te permitan todas las posibilidades de traslación o de rango de la conductividad para su aplicación a las TIC, es decir, que sean modulables”. Debido a que facilitan esa modulación, retoma Alonso, “toda la tecnología actual se sirve de los semiconductores, que incorporan un ingrediente esencial, el silicio monocristalino. Su purificación, crecimiento, dopado, etcétera se hace mediante procesos químicos, igual que muchos otros componentes de un circuito electrónico. Un segundo gran avance propiciado por la química son las pantallas. Y el tercero sería lo que el profesor Goodenough llama ‘la revolución inalámbrica’, es decir, las baterías recargables de ion-litio”.

La industria de las comunicaciones y los componentes electrónicos lleva años inmersa en una carrera veloz hacia una mayor miniaturización y diversificación. Para Juan Baselga, profesor del departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales e Ingeniería



Simulación de la reacción de moléculas de agua (rojo y blanco) y grupos de ácido (amarillo) en una membrana de célula de combustible de polímero (superficie verde).

COURTESY OF THE ENVIRONMENTAL MOLECULAR SCIENCES LABORATORY

Química de la Universidad Carlos III de Madrid, en esa competición “la química juega papeles variados e importantes: fabricación, síntesis de nuevas moléculas funcionales, de componentes orgánicos, de nuevos materiales, etcétera”. La investigación, apunta Baselga, está orientada por dos vectores: la disminución de los costes de fabricación y la búsqueda de nuevas funcionalidades. Ejemplos de lo primero serían “los semiconductores orgánicos o moléculas y macromoléculas, como el rubreno o el politiofeno”. Y de lo segundo, “la sensibilidad a la luz —importante en optoelectrónica—. La electrónica flexible o el desarrollo de electrodos transparentes son otras materias de gran interés en la actualidad”.

ductores orgánicos o moléculas y macromoléculas, como el rubreno o el politiofeno”. Y de lo segundo, “la sensibilidad a la luz —importante en optoelectrónica—. La electrónica flexible o el desarrollo de electrodos transparentes son otras materias de gran interés en la actualidad”.

Pedro Serena, coordinador científico del área de Ciencia y Tecnología de los Materiales del CSIC, subraya “el papel instrumental de la química en las TIC convencionales”, si bien afirma que, “cuando saltamos a la nanoelectrónica y sobre todo a las tecnologías que no van a estar basadas en el silicio, la química es una fuente de nuevas aproximaciones. En particular, el control que

*«La red ha facilitado la difusión del conocimiento y ha dado lugar a un desarrollo asombroso de la química»*

Miguel Ángel Alario, expresidente de la Real Academia de Ciencias y catedrático de Química Inorgánica de la Universidad Complutense de Madrid

tienen los químicos de la síntesis es clave para disponer de moléculas específicas que permitan reconocerse y autoensamblarse con el fin de formar dispositivos más complejos. Una rama entera de la electrónica del futuro se basará en la electrónica molecular, donde la química es imprescindible”.

**Laboratorios virtuales**

La revolución de las TIC ha favorecido la creación de laboratorios virtuales a disposición de los químicos. Gracias a su desarrollo, hoy se anticipan los resultados de sofisticados procesos químicos y se llevan a cabo experimentos que parecerían impensables

*«La química ha sido vital en el perfeccionamiento de las TIC tal y como las conocemos hoy»*

José Antonio Alonso, profesor de Investigación del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, del CSIC



## Llamado a revolucionar la tecnología Grafeno, la historia de un imposible

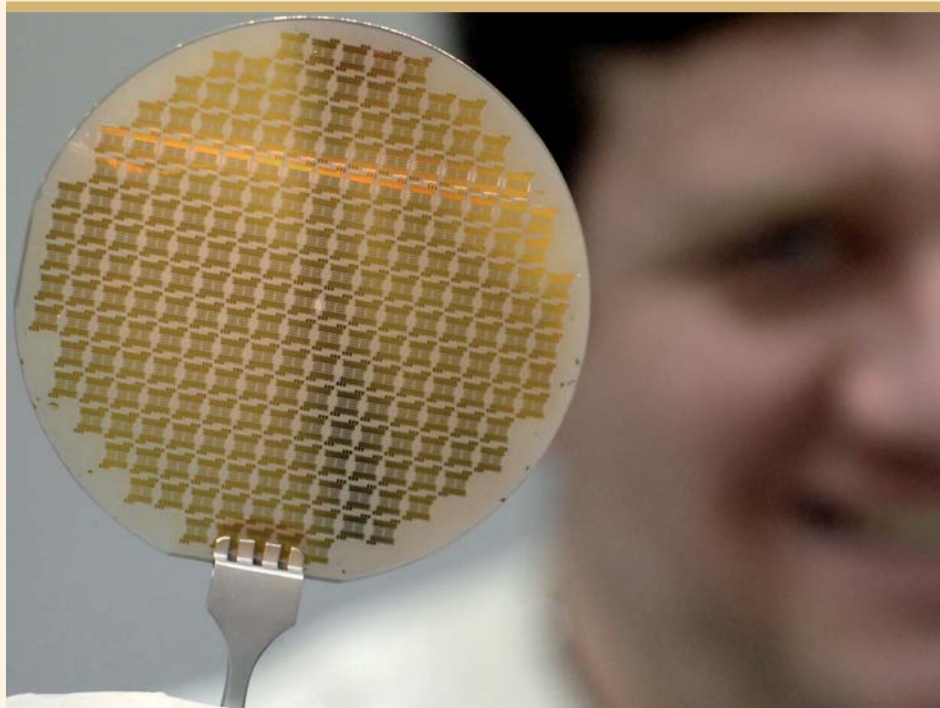
En el año 2004, los rusos Andréy Geim y Konstantin Novoselov trataban de cortar láminas muy delgadas de grafito cuando, accidentalmente, dieron con el hallazgo que convertiría a ambos en ganadores del Premio Nobel de Física de 2010. Los investigadores habían descubierto el grafeno, el material más resistente de todos los conocidos hasta el momento. Formado por una malla cristalina hexagonal de un único átomo, esta monocapa de carbono no solo mandó al diamante al segundo puesto de los elementos más duros, sino que logró posicionarse como el sólido más ligero y fino que existe. A medida que sus cualidades se iban conociendo, se fue situando en el punto de mira de los expertos. Y es que este supermaterial —anticorrosivo, inerte, flexible y muy elástico— presenta interesantes propiedades ópticas y electrónicas que han multiplicado las expectativas de

convertirlo en la estrella revolucionaria de las tecnologías de la información. De hecho, la industria lo ha incorporado rápidamente a sus filas en el desarrollo de baterías más potentes, duraderas y con mayor velocidad de recarga, así como de pantallas táctiles de dispositivos móviles y nanoelectrónicos.

Una de las últimas y más prometedoras virtudes que se han adjudicado al grafeno se basa en sus propiedades magnéticas, mediante las cuales un equipo de investigación ha conseguido crear una superficie híbrida que reacciona como un imán y que podría transformar la industria electrónica. “Al tener un comportamiento bastante exótico, cualquier cosa que se haga con él va a permitir descubrir algo nuevo y por eso crea tanta expectación”, asegura Fernando Martín, catedrático de la Facultad de Química de la Universidad Autónoma de Madrid (UAM) y uno de los científicos implicados en este estudio.

Y es que, a pesar de que cada una de sus características lo hace interesante, en realidad es la conjunción de todas ellas la que lo convierte en el material ideal con el que muchos científicos soñaron, tal como afirma Martín: “Aunque sea algo nuevo, el grafeno estaba en la mente de muchos teóricos desde el primer tercio del siglo XX”. Con el nacimiento de la mecánica cuántica ya se resolvían sistemas de una lámina de átomos de carbono, ordenados como si se tratara de un panal de abejas: “Era un ejercicio que se podía resolver a mano y que daba unas propiedades muy inusuales, pero no dejaba de ser una mera curiosidad intelectual sin la más mínima esperanza de que pudiera ser real —reconoce el experto de la UAM—. De hecho, tan increíble era hacerlo real que su descubrimiento fue algo casual”.

QEI



Placa compuesta por 22.000 estructuras de grafeno, el ‘supermaterial’ del futuro.

en los laboratorios tradicionales, como someter moléculas a temperaturas inalcanzables en la Tierra, simulando la composición de las estrellas a más de 5.000 °C, o examinar la radiación de un medio interestelar extremadamente frío a través de la pantalla de

ben principalmente a la químicos teóricos, estas herramientas se han vuelto indispensables en casi todos los ámbitos de la investigación química.

Desde estudiar la reactividad de una sustancia química a inducir un tipo de plegamiento en una proteína, pasando por el diseño de un fármaco, los programas de computación facilitan el trabajo a la hora de comprender cómo se producen procesos fundamentales. Disciplinas tan diversas como la química orgánica, de superficies y de catálisis, la espectroscopía, el magnetismo o la analítica se han propulsado como nunca en estos últimos años merced a los avances en super-

«Una rama entera de la electrónica del futuro se basará en la electrónica molecular, donde la química es imprescindible»

Pedro Serena, coordinador científico del área de Ciencia y Tecnología de los Materiales del CSIC

Feliu Maseras, investigador del ICIQ mencionado en la concesión del Nobel de Química 2013

## “Necesitamos que los departamentos de investigación de las empresas confíen más en la química computacional para explorar posibles colaboraciones”

La química computacional se alzó en aplausos el pasado mes de octubre cuando los científicos Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel recibieron el Premio Nobel de Química por sus trabajos en modelos multiescala de sistemas químicos complejos. Entre los químicos que citaba la Real Academia Sueca de las Ciencias por sus importantes contribuciones en este campo figuraba el nombre de un español, Feliu Maseras. Tras doctorarse en 1991 por la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB), se marchó a Japón, donde estuvo como becario posdoctoral en el Instituto de Ciencia Molecular junto con Keiji Morokuma, también mencionado en la concesión del Nobel. Posteriormente, Maseras trabajó en el equipo de Odile Eisenstein en la Universidad de Montpellier (Francia) y, desde 1998, es profesor titular en la UAB y responsable de grupo en el Instituto Catalán de Investigación Química (ICIQ).

**Pregunta.** *¿En qué medida han contribuido los métodos multiescala a la disciplina de la química computacional?*

**Respuesta.** Los métodos multiescala permiten el uso de distintas técnicas para diferentes regiones del sistema químico. Por un

lado, existen métodos muy precisos pero caros, como el cuántico, que solo se pueden aplicar para describir una región pequeña del sistema. Por otro lado, están los métodos de mecánica molecular, que se utilizan para sistemas muy grandes y con menos coste computacional; por ejemplo, hay sistemas químicos como las enzimas, que cuentan con un centro activo que hay que describir con mayor precisión y una región de proteína bastante más grande, que engloba al centro activo y se diferencia mucho de este. Gracias a los métodos multiescala podemos estudiar el sistema global, aplicando métodos cuánticos en el estudio del centro activo y métodos de mecánica molecular para el resto.

**P.** *¿Qué aportaciones ha hecho usted al trabajo de Karplus, Levitt y Warshel?*

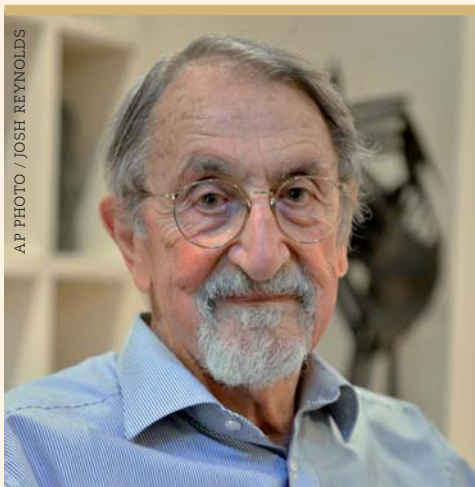
**R.** Los tres premiados contribuyeron de manera fundamental al desarrollo inicial de la química computacional. Mis trabajos consisten en una modificación de estos métodos multiescala para extender su aplicación a distintos ámbitos de la bioquímica, como la catálisis homogénea.

▶ computación. Tanto que este año el Premio Nobel de Química ha recaído sobre el austriaco Martin Karplus, el sudafricano Michael Levitt y el israelí Arieh Warshel, los científicos que sentaron las bases de los complejos programas de simulación que han hecho posible la química del siglo XXI.

Los orígenes de la química computacional se remontan a mediados del pasado siglo, cuando el estadounidense Linus Pauling, premio Nobel de Química de 1954, erigió los puentes hoy consolidados entre la física cuántica y los procesos químicos, convirtiendo los ordenadores en la herramienta clave para encontrar la solu-

ción a ecuaciones demasiado arduas para ser resueltas en una pizarra.

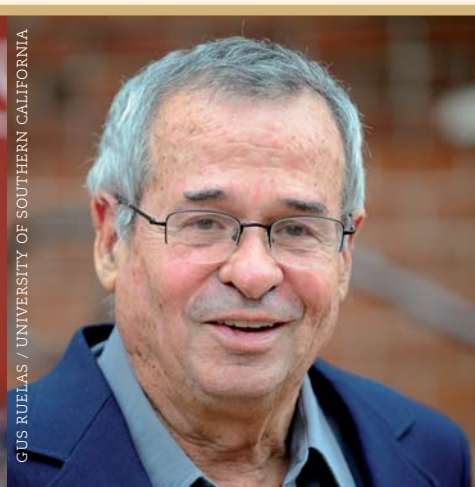
No obstante, quien marcó el punto de inflexión fue John A. Pople. Este químico y matemático inglés recibió el Nobel de Química en 1998 como reconocimiento a sus desarrollos en métodos de computación cuánticos, que dieron lugar al *software* Gaussian, “uno de los programas más extendidos actualmente en la química y que se basa en aplicar las ecuaciones más básicas de la mecánica cuántica”, explica Florentino Borondo, catedrático de Química Cuántica en la Universidad Autónoma de Madrid (UAM).



AP PHOTO / JOSH REYNOLDS



ERIC RISBERG / STANFORD UNIVERSITY



GJJS RUELAS / UNIVERSITY OF SOUTHERN CALIFORNIA

De izquierda a derecha, Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel, premios Nobel de Química 2013.



Feliu Maseras, en las instalaciones del ICIQ.

A pesar del éxito que supusieron los mecanismos de Pople aplicados a moléculas sencillas como el hidrógeno, estos no eran capaces de describir sistemas más complejos como el ADN, un gran reto que superaron Karplus, Levitt y Warshel. “Hace más de 20 años, debido a la capacidad limitada de los ordenadores, todo lo que se podía hacer eran modelizaciones basadas en unas aproximaciones tan grandes que cualquier parecido entre realidad y simulación era pura coincidencia”, recuerda Fernando Martín, catedrático de Química Teórica en la UAM. Pero hoy, gracias a unos sistemas cada día más veloces y potentes, “ya es posible tratar sistemas reales con un coste moderado, lo que permite hacer observaciones más allá de la prueba y del error que, de otra manera, serían inviables en un laboratorio”, señala la Martín.

### Del Gaussian a la autoprogramación

La modelización computacional se basa en los llamados cálculos o modelizaciones de primeros principios, programas que ayudan a predecir y entender el comportamiento de un sistema químico, igual que si el experimento tuviera lugar en los tubos de ensayo. Además, suponen una potente herramienta añadida para explotar al máximo los datos obtenidos en laboratorios experimentales. Así, “mediante

**P.** ¿Cuáles son los desafíos a los que se enfrenta su especialidad?

**R.** A nivel general, conseguir un mayor impacto práctico, que en parte se refleja en la colaboración con la industria. El problema es especialmente agudo en España. Creo que sobre todo se debe a la falta de comunicación. La química computacional está lo suficientemente madura como para dar respuestas a problemas prácticos y necesitamos que los departamentos de investigación de las empresas confíen más en nosotros para explorar posibles colaboraciones.

**P.** ¿Cómo se sitúa la química computacional en nuestro país?

**R.** Afortunadamente, creo que goza de buena salud, como reflejan la mayoría de los indicadores bibliográficos. Un factor importante es que nos beneficiamos de una tradición iniciada por los pioneros que la lanzaron aquí, cuando también estaba en sus orígenes a nivel internacional. En comparación con la química de laboratorio experimental, tenemos una mayor flexibilidad para el cambio de líneas de investigación y una menor inversión inicial en infraestructuras, aunque también es cierto que necesitamos dinero y nos vemos perjudicados seriamente por los actuales recortes.

**P.** Akira Suzuki, premio Nobel de Química en 2010, también hacía referencia a un artículo firmado por usted sobre una investigación que desarrolló en el ICIQ. ¿Qué se siente al haber sido mencionado dos veces durante las citas del galardón?

**R.** Es una satisfacción ver mi nombre en las referencias bibliográficas de los Nobel. Eso quiere decir que, por lo menos, hemos acertado en la elección del tema de investigación. **QEI**

un ordenador, es posible simular la realidad, encontrar conexiones lógicas entre distintos datos con los que extraer conclusiones muy relevantes y llevar a cabo un experimento que, por sus características, es muy difícil realizar en un laboratorio, ya sea porque no existen las herramientas necesarias, porque es peligroso o, simplemente, porque supone un coste muy elevado”, cuenta Fernando Martín.

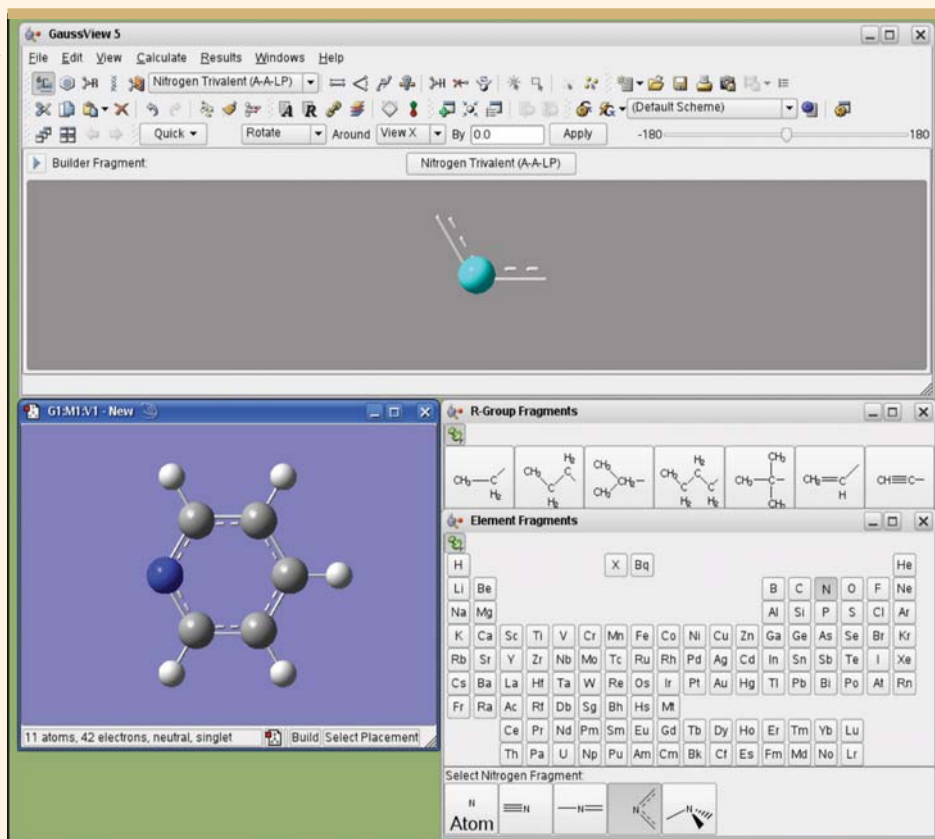
Los programas informáticos que componen los laboratorios virtuales de la química pueden ser de lo más variados, desde los más comerciales y sencillos hasta los más sofisticados, basados en sistemas de supercomputación. El Gaussian, el primero que se diseñó y que abrió el camino a todos los demás, ha sufrido multitud de actualizaciones y hoy sirve para tareas tan concretas como estudiar la estructura de una proteína o construir una molécula. De fácil manejo, utiliza unas interfaces muy intuitivas entre las que se encuentra el propio sistema Windows. “El Gaussian es tan accesible que hasta se ha desarrollado una versión como aplicación para el iPhone”, detalla Borondo.

Cuando se trata de abordar problemas más exigentes y especializados, hay que recurrir a aplicaciones que requieren recursos de supercomputación. Por ello, muchos grupos de investigación el-

*«El programa Gaussian se basa en aplicar las ecuaciones más básicas de la mecánica cuántica»*

Florentino Borondo, catedrático de Química Cuántica en la Universidad Autónoma de Madrid





Construcción de una molécula con el programa informático Gaussian.

boran sus propios programas al no encontrarlos en el mercado. En numerosos casos, tras implementarlo, han visto las posibilidades de comercializarlo y han formado su propia empresa. “Nuestro *software* es casero porque muchas de las herramientas que necesitamos funcionan con supercomputación, obligando a utilizar un programa especialmente diseñado para ser ejecutado por supercomputadores que, a su vez, hacen uso de varios procesadores paralelos”, desgrana Martín. Si no fuera por las técnicas informáticas mencionadas, este experto considera que sería imposible avanzar en su investigación, enmarcada en el terreno de la femtoquímica, la ciencia que estudia las reacciones químicas a escala ultrarrápida, en femtosegundos ( $10^{-15}$  segundos).

Un caso práctico: para observar el movimiento de un electrón hay que sacar fotografías en intervalos temporales del orden de femtosegundos, y en un segundo hay tantos femtosegundos como segundos en cien millones de años. O como ilustra el catedrático de la UAM, “es como si quieres hacer una película del movimiento de un coche de Fórmula 1. Primero tendrás que sacar fotogramas con unos intervalos temporales de microsegundos, porque el vehículo recorre 20 metros en un segundo. Entonces, para conseguir la sensación de movimiento, deberás sacar mil fotografías en un segundo. Para ello se utilizan unos láseres cuyos pulsos duran unos cuatro attosegundos ( $10^{-18}$  segundos), la escala de tiempo en que se mueve la dinámica electrónica de los átomos y que representa intervalos menores que los femtosegundos”. No obstante, “estos

láseres los hacen muy pocos laboratorios, ya que son experimentos muy costosos, requieren grandes infraestructuras y las instalaciones son compartidas por varios países”, puntualiza Fernando Martín.

Las modelizaciones permiten especificar cómo deben hacerse las fotografías, ahorrar enormes cantidades de dinero y lograr las claves para manipular el movimiento de los electrones, responsables de la reactividad química, lo que abre un sinfín de opciones en distintas aplicaciones de desarrollo tecnológico y científico. Al margen de la reducción de instrumentos y material, se economiza el número de profesionales y horas necesarias para desempeñar labores muy específicas. “En el mundo de la modelización teórica, y en concreto en la supercomputación, uno se puede permitir el lujo de elegir el número de procesadores que va a realizar cada una de las tareas”, relata Martín. Cuando se estudian sistemas muy complejos, con docenas de miles de átomos, se pueden usar muchos procesadores en paralelo, lo que equivaldría a tener un laboratorio con miles de personas trabajando al mismo tiempo: “Al final, si sumas las horas de cada uno de ellos, pueden salirte 20 años de trabajo en total. Esto, dividido entre 1.000 procesadores, se

reduce a uno o pocos meses, con un coste no muy alto y que te posibilita avanzar muy rápido”, concluye.

Los saltos de gigante que las nuevas tecnologías han permitido dar a la ciencia también han llegado a la industria, que se ha visto tremendamente beneficiada por numerosas aplicaciones informáticas. “Cualquier empresa que se dedique a la producción necesita un seguimiento completo de sus procesos y una verificación de que todos los datos de su planta están informatizados”, expone Jordi Rochera, director de proyectos en Ceteck Tecnológica,

compañía que ha creado un sistema de gestión de la fabricación inteligente para industrias químicas.

Normalmente, las factorías trabajan con un mecanismo que controla los estándares de calidad y que garantiza el mantenimiento de la temperatura, la humedad, el peso o las

proporciones de un producto. “Las aplicaciones que nosotros desarrollamos conectan con esos programas estándar para intercambiar datos en tiempo real, de manera que, cuando los sensores detectan cierta anomalía durante la producción, avisan de un posible fallo antes de que este ocurra”, explica Rochera. Estas aplicaciones no solo evitan, por ejemplo, que el bloqueo de una máqui-

*«Ya es posible tratar sistemas reales con un coste moderado, lo que permite hacer observaciones que serían inviables en un laboratorio»*

**Fernando Martín, catedrático de Química Teórica en la Universidad Autónoma de Madrid**

na paralice toda una línea de producción, sino que ayudan a determinar las condiciones idóneas para conseguir una mayor rentabilidad. “Se pueden llegar a utilizar millones de señales a la vez y eso, en una industria como la química, contribuye a la mejora continua de la producción”, resalta Rochera.

### Cuando el tamaño importa

Entre la investigación básica y las aplicaciones en el mercado se mueve la nanotecnología, un mundo en el que un átomo de más o de menos puede marcar la diferencia y alterar drásticamente las propiedades de un material. El reto ya no es seguir trabajando en nuevos transistores, sino buscar un cambio de paradigma que transforme totalmente la actual electrónica y que ponga fin, en cuestión de décadas, a la era del silicio. ¿Se conseguirá? No inmediatamente. Para que una tecnología sustituya a otra es

necesario que mejore sus prestaciones en varios órdenes de magnitud o que goce de unas características que no posea la anterior. Este es el desafío que tiene ante sí la nano-electrónica.

En esta área las fronteras se desdibujan y la química, la física, la ciencia de materiales y la ingeniería química se dan la mano. Así opina Nazario Martín, director adjunto del Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia) y catedrático de Química Orgánica de la UCM: “Si bien el concurso de físicos e ingenieros es imprescindible, la aparición de los materiales más adecuados no po-

drá realizarse sin la química”, una apreciación que ratifica Castañeda cuando dice que “el químico brinda los instrumentos, esto es, la materia prima que facilita la creación de materiales de interés para el desarrollo de este nuevo campo”.

Así, no solo se abre el camino a aplicaciones sorprendentes, como nanorrobots que circulen por nuestros vasos sanguíneos o el afamado ascensor espacial que busca alcanzar la órbita de la Tierra. En lo que al tratamiento de la información se refiere, la nanotecnología es la herramienta que plantará cara al anunciado fin de la ley de Moore, que preconiza que la densidad de transistores en un dispositivo se dobla cada año y medio, principio que se ha venido cumpliendo de manera inexorable durante las tres últimas décadas. El avance de nuevas tecnologías, como los microscopios de campo cercano o de barrido de efecto túnel, permite ver y manipular la materia a escala atómica y construir microprocesadores más pequeños, potentes y veloces. Para Nazario Martín, “las TIC han experimentado un desarrollo espectacular. Sin embargo, aún no se ha tocado techo y cabe esperar un crecimiento progresivo que conduzca a una tecnología de miniaturización que, al ▶

*«Nuestras aplicaciones pueden intercambiar millones de datos a la vez y eso, en una industria como la química, contribuye a la mejora continua de la producción»*

Jordi Rochera, director de proyectos de la empresa Ceteck Tecnológica

# interpack®

PROCESSES AND PACKAGING  
LEADING TRADE FAIR

DÜSSELDORF, GERMANY  
08<sup>TO</sup> 14 MAY 2014  
[INTERPACK.COM](http://INTERPACK.COM)

# EVERY INNOVATION HAS ITS STARTING POINT

CHECK-IN  
NOW!



► tiempo, dé lugar a dispositivos mucho más rápidos, eficaces y de menor tamaño”.

En esta escala de lo ínfimo se encuentra la electrónica molecular, en la que los químicos juegan un rol principal. Según el experto del IMDEA-Nanociencia, este campo emergente “tiene como meta acceder a circuitos y dispositivos electrónicos contruidos mediante moléculas, utilizando los átomos, y especialmente las moléculas, para formar estructuras más complejas que sean capaces de ejercer una función”. De esta forma, se habla de cables, interruptores o rectificadores moleculares. La visualización y la manipulación de átomos y moléculas son las claves para hacer realidad esos circuitos moleculares. “Al ser una ciencia interdisciplinar, los químicos resultan necesarios en el diseño molecular para que las partículas sintetizadas sepan reconocerse y ensamblarse. Aquí, la química supramolecular jugará, como ya está haciendo, un papel esencial”, prevé Nazario Martín.

*«Nuestro trabajo está más próximo a la creación de nuevos materiales de interés para el desarrollo de la nanoelectrónica»*

**Nazario Martín, director adjunto de IMDEA-Nanociencia y catedrático de Química Orgánica de la Universidad Complutense de Madrid**

En este marco, los materiales llamados a sustituir al silicio son las moléculas orgánicas electroactivas, es decir, aquellas que responden a estímulos eléctricos. Son los casos del fullereno, el nftaleno y los derivados de polipirrol. Todas son capaces de transportar la carga eléctrica y su estudio guiará, en un futuro, a construir nanotransistores a partir de moléculas nacidas para comportarse como un conductor o un conmutador. Otras, a su vez, contarán con un núcleo magnético que ayudará a fabricar memorias diminutas. Este entramado nanométrico posibilitará la creación de circuitos

integrados, en los que la corriente eléctrica fluirá a través de algunas moléculas: unas almacenarán información y otras transformarán estos datos en energía que viaje al exterior. La idea puede parecer todavía arriesgada, pero lo cierto es que, en algunos laboratorios, ya se manejan moléculas para realizar ciertas operaciones lógicas y funcionar como transistores o conmutadores.

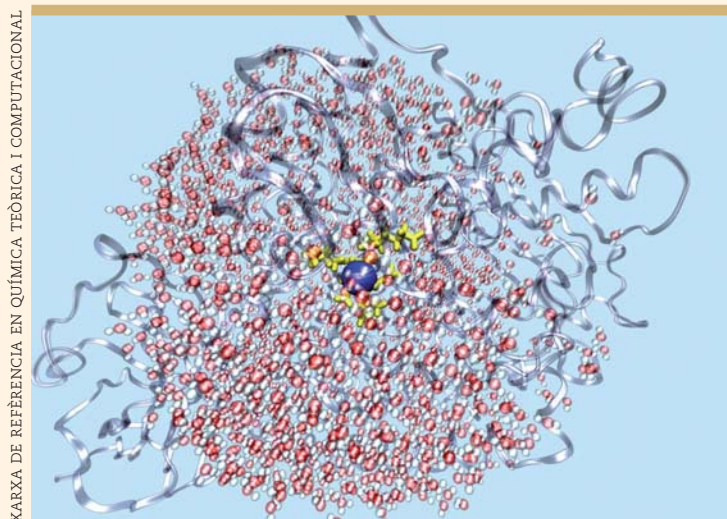
Las distintas formas del carbono, desde el grafeno a los fullerenos, pasando por los nanotubos, además de otras más exóticas como los nanocuernos o las nanocebollas de carbono, anticipan una revolución en la ciencia de los materiales que promete cambiar nuestras vidas. Los nanotubos, en concreto, no solo son capaces de conformar un material de extrema dureza, sino que además poseen unas cualidades electrónicas excepcionales y, en función de su configuración, pueden mostrar propiedades metálicas o semiconductoras. Incluso transportan la corriente eléctrica sin apenas resistencia y son fácilmente compatibles con las moléculas de origen orgánico. En la actualidad, los científicos especulan con la posibilidad de elaborar circuitos basados totalmente en nanotubos de carbono, lo que serviría como puente para pasar de la tecnología del silicio a otra sustentada en el carbono. Así lo ha demostrado un equipo de la Universidad de Stanford (Estados Unidos) que, el pasado mes de septiembre, presentaba el primer ordenador fabricado con estructuras de nanotubos de carbono. El resultado ha sido un dispositivo más rápido, eficiente y diminuto que los basados en chips de silicio.

**Mucho más que plásticos**

Otros elementos bien conocidos por los químicos y que tienen mucho que decir en el ámbito de las TIC son los polímeros, ya omnipresentes en la sociedad a través de los plásticos o el cloruro de polivinilo (PVC). De todos ellos destacan los denominados polímeros conductores. Descubiertos en 1974 y mercedores del premio Nobel de Química en el año 2000 —otorgado a Alan J. Heeger, Alan G. MacDiarmid y Hideki Shirakawa—, estos materiales, denominados también metales sintéticos, conducen la electricidad como los metales y los semiconductores; son capaces de emitir luz —con ellos se fabrican las bombillas led—, y presentan las propiedades mecánicas de los polímeros y un bajo coste económico. Las baterías orgánicas y las pantallas de teléfonos móviles son algunas de sus aplicaciones.

Los polímeros —además del silicio— sirven de base sobre la que se enlazan diversos elementos funcionales, ya sean chips convencionales, dispositivos nanomecánicos o moléculas orgánicas autoensambladas, dando lugar a los sistemas nanoelectromecánicos (NEM). La nanoquímica, la química convencional y la ingeniería confluyen así en los laboratorios, donde se busca la manera de aplicar todo el conocimiento generado en las nuevas tecnologías. Es lo que hace desde hace más de diez años, primero con nanocompuestos de base polimérica y después con los nanotubos de carbono, el Grupo de Investigación de Polímeros y Composites de la Universidad Carlos III, dirigido por Juan Baselga. “Desde un punto de vista fundamental, el principal problema es ensamblar los nanotubos para fabricar probetas macroscópicas. El enorme cambio de escala, de la dimensión nano a la macro, complica las cosas”, comenta su res-

FUNDETEC SPAIN



Recreación del comportamiento de la enzima de la lipoxigenasa.

XARXA DE REFERÈNCIA EN QUÍMICA TEÓRICA I COMPUTACIONAL

## Helena Herrero, química y presidenta de HP para España y Portugal “Somos líderes en áreas como la impresión, donde la química es imprescindible”

**T**ras más de treinta años de carrera en Hewlett-Packard (HP), Helena Herrero fue nombrada en julio de 2012 máxima directiva de la compañía para España y Portugal. De formación química y con experiencia en la investigación, metió el pie en el área de química analítica de HP, desde donde saltó al departamento de ventas y fue ocupando distintas posiciones hasta liderar una de las mayores empresas del mundo dedicadas a las tecnologías de la información. Eso sí: a día de hoy, Herrero sigue conservando su pasión por la ciencia.



Helena Herrero, presidenta de Hewlett-Packard para España y Portugal.

**Pregunta.** ¿Qué destacaría de la empresa que preside?

**Respuesta.** Buscamos desarrollos e innovaciones a largo plazo. Nos preguntamos qué va ocurrir en el futuro en cinco o diez años y qué es lo que va a preocupar a los consumidores del mañana. De hecho, esa es una de las cosas que más me atrajo y me sigue atrayendo de HP, porque ese afán de buscar la innovación está en la cultura genética de nuestra compañía.

**P.** ¿Qué papel juega la química en los desarrollos tecnológicos de HP?

**R.** Somos líderes en áreas como la impresión, donde la química es imprescindible: cómo se calientan los pigmentos, cómo se extiende esa tinta sobre el papel para que sea duradera y soste-

nible... Además, en Sant Cugat del Vallés (Barcelona) se encuentra el centro mundial de I+D en impresión de gran formato y el centro de demostración de impresoras de Europa.

**P.** ¿Qué le ha aportado su formación como química al trabajo que ha desarrollado más adelante?

**R.** Mi interés por la carrera de Química nacía de una curiosidad por entender el porqué de las cosas, entender el contexto y distinguir lo que de verdad es importante. La química te aporta una formación basada en hechos y te enseña a conectar puntos.

Te da una visión diferente de las cosas. Además, gracias a mi formación química entré en una empresa como HP.

**P.** ¿Qué puertas le puede abrir su compañía a un químico joven?

**R.** Todos los años incorporamos a unas 50 personas desde la universidad. Es una oportunidad y evidentemente, después de estar dos años de prácticas en las distintas áreas de HP, la mayoría se incorpora de manera definitiva. Es una forma de rejuvenecer la plantilla y aporta lo que para mí es fundamental: el talento joven. Los nuevos químicos pueden entrar en campos específicos de investigación, pero es en la parte comercial donde tienen más posibilidades. Hay muchas universidades con las que estamos trabajando; yo, de hecho, empecé así. Esta es una de las facetas más importantes de la compañía.

**P.** ¿Qué le empuja a enfrentarse cada día a una tarea tan exigente como es la presidencia de HP?

**R.** Tengo una máxima, que es hacer mi trabajo con una enorme pasión. Procuero poner toda mi alma, mi esfuerzo y mi energía en las cosas que hago, porque creo que eso hace que la vida merezca la pena. Siempre he querido buscar la excelencia en el trabajo; en este caso, que la compañía escuche a los clientes, entienda sus necesidades y se acerque a ellos. Y, por otro lado, me parece esencial el pensar en grande y actuar en pequeño.

**P.** ¿Qué le diría a un joven químico recién licenciado?

**R.** Le aconsejaría que pensara en grande. Le diría que si quiere conseguir algo debe luchar por ello. Que tenga afán de aprendizaje. Hoy en día tienen que enfrentarse a unas circunstancias difíciles que les puede hacer venirse abajo, pero deben hacer justo lo contrario: buscar, insistir y tener una visión más abierta. En el mundo laboral hay algo muy importante, que es saber conectar, tener amplitud de miras y una actitud responsable en el trabajo, ser flexible y desarrollar esas habilidades que te hacen diferente a la hora de conseguir un empleo. Le diría que el mundo es global, que trace su hoja de ruta y aproveche las oportunidades que se le pongan por delante. Tiene que saber lo que quiere y luchar por ello. El *never give up* (nunca te rindas) es importante.

QEI



► ponsable, quien, pese a la dificultad del objetivo, confía en ir “en la buena dirección” para alcanzar la escala macro.

La combinación de nanotubos de carbono con polímeros da como fruto un material de gran conductividad, aunque no tan elevada como la de los metales. Su estudio llevó al grupo de la Universidad Carlos III a trabajar en el campo del apantallamiento electromagnético, que se relaciona con la interferencia electromagnética en dispositivos electrónicos. La forma más sencilla de apantallar una radiación es colocando una lámina metálica entre el elemento emisor y el receptor. “El inconveniente —aclara Basella— es que los metales son muy densos y reflejan muy eficientemente las radiaciones electromagnéticas, con lo que, en lugar de resolver el problema, solo lo cambiamos de sitio y aumentamos la masa del dispositivo. El reto en esta área pasa por conseguir materiales absorbentes de microondas, esto es, que reflejen muy poco y que tengan baja densidad”.

### Pantallas en la ropa

El estudio de la luz, es decir, la ciencia fotónica, ha sido clave en el desarrollo de las pantallas de cristal líquido, prácticamente presentes en todo tipo de aplicaciones. Y no solo eso: la investigación en los entresijos de la luz también es esencial en tecnologías como sistemas de comunicación láser entre satélites, pinzas ópticas para manipular partículas minúsculas, producción de imágenes en 3D, creación de dispositivos de imagen de ayuda para sordos, etc.

El futuro deparará invenciones tan insólitas como las que anticipa José Manuel Otón, químico y catedrático de Tecnología Fotónica de la Universidad Politécnica de Madrid: “En unos años, por ejemplo, los OLED —diodos orgánicos de emisión de luz— de polímero permitirán sustituir el salpicadero del coche por una pantalla continua, adaptada a las curvas del vehículo, que ofrecería cualquier dato requerido por comandos de voz. A través de la realidad aumentada, la información también se proyectaría sobre la luna del parabrisas sin necesidad de bajar la vista. Las pantallas flexibles se podrían incorporar, además, a prendas de ropa, desde donde realizarían monitorizaciones constantes de parámetros de interés médico”.

Una de las parcelas de trabajo de Otón abarca los cristales líquidos, donde se buscan materiales de menor viscosidad que presenten, por lo tanto, un menor tiempo de respuesta a la inducción de campos eléctricos. A pesar de contar con una de las mejores colecciones de cristal líquido de Europa, este experto se vuelca en

“todo tipo de aplicaciones no ligadas a pantallas: comunicaciones por fibra óptica, desviadores de haz para láseres, modificadores de polarización...”. Y es que en Europa y Estados Unidos “se ha dado por perdida la batalla de la investigación en pantallas de cristal líquido, ya que todo el desarrollo actual se lleva a cabo en Extremo Oriente”, admite. Países como China, Japón, Corea del Sur o Taiwán han hecho tal apuesta financiera en I+D en ese ámbito que, a día de hoy, es imposible competir con ellos.



BROOKHAVEN NATIONAL LABORATORY

La investigación de baterías de ion-litio se orienta a campos tan diversos como la automoción o la telefonía móvil.

Otro de los territorios relacionados con las TIC en el que la investigación química desempeña un rol fundamental es el de las baterías, que ha dado lugar, tal como se anunciaba al comienzo de este reportaje, a la revolución inalámbrica —protagonizada por teléfonos móviles, tabletas y ordenadores portátiles— y, por supuesto, por su corazón energético, las baterías de ion-litio. “Aún constituyen un campo al que se dedica una intensa investigación —revela José Antonio Alonso—, no solo sintetizando e identificando nuevos electrodos que hagan aumentar la capacidad de carga

o el régimen de carga y descarga, sino también alumbrando nuevos electrolitos que incrementen la ventana útil de voltaje”.

“Todo lo vinculado con fuentes de energía exige una posterior conversión que involucra procesos químicos —resume Alonso— y constituye un campo de investigación fascinante que implica a la química y que tiene una repercusión final en las TIC”. Por eso, las necesidades surgidas en los coches eléctricos o las energías renovables impulsan la búsqueda de nuevas respuestas que, quizá algún día, se acaben trasladando a las computadoras de casa. En este sentido, gran parte de los esfuerzos científicos se dirigen a proporcionar grandes densidades de carga. Para ello —agrega este profesor del CSIC— “no solo se intentan sintetizar y caracterizar nuevos materiales de electrodo, sino que se están inventando y optimizando conceptos

muy novedosos y rompedores, como las pilas de litio-aire o de litio-agua”. Igualmente, “las baterías en las que el sodio sustituye al litio comienzan a despertar mucho interés”, sobre todo en “aplicaciones en las que el peso no sea un problema, ya que su precio es muy inferior y su disponibilidad es infinita”, declara Alonso.

La ciencia avanza imparable y algunas de sus apuestas acabarán desembocando en nuestros ordenadores y dispositivos móviles. No podemos señalar con certeza cuáles de ellas cristalizarán ni cómo lo harán, pero sí sabemos dos cosas: que la mayoría de las pistas para conocer su desarrollo están ya dentro de los laboratorios y que, en cualquier caso, nos sorprenderán.

qeI

*«En unos años, los OLED de polímero permitirán sustituir el salpicadero del coche por una pantalla continua, que ofrecería información requerida por comandos de voz»*

José Manuel Otón, químico y catedrático de Tecnología Fotónica de la Universidad Politécnica de Madrid