

SIMULACIÓN EN NANOTECNOLOGÍA

Lic. Aldo R. Valdez Alvarado

Universidad Mayor de San Andrés

Carrera de Informática

Teoría de la Información y

Codificación

aldo_valdez@hotmail.com

RESUMEN

En el presente artículo se da una visión general de la nanotecnología, donde a partir de la identificación de sus componentes, se revisa el estado del arte en cuanto a la simulación de los elementos de la nanotecnología, además de presentar algunas soluciones de software para este cometido.

Palabras Clave

Nanociencia, nanotecnología, nanómetro, modelo, simulación.

1. INTRODUCCIÓN

Si bien la idea de manejar escalas cada vez mas pequeños, se ha estado manejando mucho antes del nacimiento de la nanotecnología, como no hace mucho el “micro” era el rey de lo pequeño, desde micrófonos o microondas hasta microscopios o microorganismos, todo lo “micro” era mejor.

Desde la invención de los teléfonos celulares y los chips de computadora, estos han seguido una línea fija, reducir cada vez mas su tamaño, sin embargo la miniaturización a micro escala ha llegado físicamente tan lejos como podía llegar, los circuitos han llegado a ser tan pequeños que cuando funcionan se calientan tanto que incluso podrían quemarse.

Para obtener mayor velocidad y poder, la electrónica tiene que usar la nanotecnología, y la nanociencia como el estudio de los átomos y moléculas.

2. NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA

2.1. Nanociencia

La nanociencia, etimológicamente proviene según algunos autores del griego “nano” o del latín “nanus” que significa en ambos casos “enano”, lo que podría entenderse como la ciencia de las cosas pequeñas. Sin embargo, científicamente **nano** se refiere a la billonésima parte de algo, por ejemplo, un nanómetro es igual a 10^{-9} metros, un nanosegundo es 10^{-9} segundos.

Esta escala permite medir cosas extremadamente pequeñas, como una molécula de hidrogeno que es igual a 0,1 nanómetros, un cabello humano es igual a 100.000 nanómetros. La nanociencia

es el estudio de átomos, moléculas y objetos cuyo tamaño se mide sobre la escala nanométrica (1-100 nanómetros).

El padre de la “nanociencia”, es considerado **Richard Feynman**, premio Nóbel de Física, quién en 1959 propuso fabricar productos en base a un reordenamiento de átomos y moléculas. En 1959, el gran físico escribió un artículo que analizaba cómo los ordenadores trabajando con átomos individuales podrían consumir poquísima energía y conseguir velocidades asombrosas.

La **nanociencia** está unida en gran medida desde la década de los 80 con Drexler y sus aportaciones a la “nanotecnología molecular”, esto es, la construcción de nanomáquinas hechas de átomos y que son capaces de construir ellas mismas otros componentes moleculares. Desde entonces **Eric Drexler**, se le considera uno de los mayores visionarios sobre este tema. Ya en 1986, en su libro “Engines of Creation” introdujo las promesas y peligros de la manipulación molecular. Actualmente preside el Foresight Institute.

La nanociencia es distinta a las otras ciencias porque aquellas propiedades que no se pueden ver a escala microscópica adquieren importancia, como por ejemplo, propiedades de la mecánica cuántica y termodinámica. En vez de estudiar materiales en su conjunto, los científicos investigan con átomos y moléculas individuales. Al aprender más sobre las propiedades de una molécula, es posible unirlos de forma muy bien definida para crear nuevos materiales con nuevas e increíbles características

2.2. Nanotecnología

La palabra “**nanotecnología**” es usada extensivamente para definir las ciencias y técnicas que se aplican a un nivel de nanoescala, esto es a medidas extremadamente pequeñas llamadas “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.

La nanotecnología es el estudio, diseño, creación, síntesis, manipulación y aplicación de materiales, aparatos y sistemas funcionales a través del control, la explotación de fenómenos y propiedades de la materia a nanoescala. Cuando se manipula la materia a una escala tan minúscula, a una escala de átomos y moléculas, demuestra fenómenos y propiedades totalmente nuevas. Por lo tanto, científicos utilizan la nanotecnología para crear materiales, aparatos y sistemas novedosos y poco costosos con propiedades únicas

Nos interesa, más que su concepto, lo que representa potencialmente dentro del conjunto de investigaciones y aplicaciones actuales cuyo propósito es crear nuevas estructuras y productos que tengan un gran impacto en la industria o la medicina (nanomedicina), por ejemplo.

Estas nuevas estructuras con precisión atómica, tales como los nanotubos de carbón, o pequeños instrumentos para el interior del cuerpo humano, pueden introducirnos en una nueva era, nos llevarán a una segunda revolución industrial en el siglo XXI, tal como señala Charles Vest (ex-presidente del MIT).

Los avances nanotecnológicos, serían los protagonistas de la sociedad del conocimiento, cuyo desarrollo tendría una gran repercusión en la instrumentación empresarial y social. Supondrá también numerosos avances para muchas industrias y nuevos materiales como materia prima, con propiedades extraordinarias (desarrollar materiales más fuertes que el acero pero con solamente diez por ciento el peso), nuevas aplicaciones informáticas con componentes increíblemente más rápidos o sensores moleculares capaces de detectar y destruir células cancerígenas en las partes más delicadas del cuerpo humano como el cerebro, entre otras muchas aplicaciones.

3. CATEGORÍAS EN NANOTECNOLOGÍA

Si seguimos la evolución de la nanotecnología, se observa que sin importar los resultados del mercado, la nanociencia nunca será un sector particular de la industria, si no mas bien al ser una ciencia con muchas áreas de aplicación, redefinirá el rumbo de muchos sectores de la industria en general. Lo anterior nos permite reconocer que la nanotecnología no es una, sino mas bien un conjunto de tecnologías, que producen un conjunto de descubrimientos técnicos que pueden usarse en diferentes mercados.

Así, el mundo de la nanotecnología puede dividirse en tres grandes categorías: nanoestructuras o nanomateriales, nanoherramientas, y nanodispositivos. Los componentes de estas categorías se observan en la figura 1.

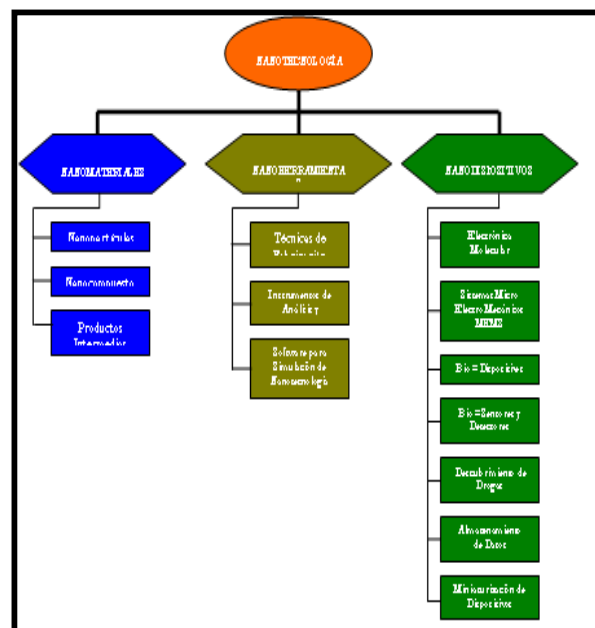


Figura 1. Categorías de la Nanotecnología

3.1. Nanomateriales

Los nanomateriales son materiales con una microestructura cuyo tamaño característico es de unos pocos nanómetros (típicamente 1-100). Esta microestructura se refiere a su composición química, al ordenamiento de sus átomos (la estructura atómica), y el tamaño de un sólido en una, dos o tres dimensiones. Los efectos para controlar los nanomateriales incluyen efectos de tamaño (donde los tamaños críticos del fenómeno físico se vuelven comparables con el tamaño característico de un gran bloque de construcción de una microestructura) los cambios dimensionales del sistema, los cambios de la estructura atómica, entre otros.

La síntesis, caracterización, y procesamientos, de nanomateriales son parte de una área que emerge y crece rápidamente. La investigación y desarrollo en esta área tiene mayor énfasis en descubrimientos científicos relacionados a la generación de nanomateriales con características microestructurales controladas, la investigación de su procesamiento a materia con propiedades ingenieriles, y funciones tecnológicas permite la introducción a nuevos conceptos y métodos de fabricación.

Los nanomateriales se agrupan en nanopartículas (los bloques de construcción), nano intermediarios y nanocompuestos. Estos pueden o no estar en un equilibrio termodinámico.

3.2. Nanoherramientas

Las nanoherramientas son dispositivos que manipulan la materia a un nivel manométrico o atómico. Dispositivos tales como microscopios atómicos, dispositivos de eliminación de capas atómicas, dispositivos y herramientas de nanolitografía. Algunas otras herramientas incluyen, técnicas de fabricación, análisis i metrología de instrumentos y software para la investigación y

desarrollo de la nanotecnología. Estos se usan en litografía, dispositivos de eliminación de vapores químicos, impresiones 3D, y nanofluidos, usados en la nanomedicina.

3.3. Nanodispositivos

Los nanodispositivos son cualquier sistema, cuyos componentes son nanomateriales, cuya función no es otra que manejar cuestiones de nanotecnología. Los primeros dispositivos en el mercado fueron los biodetectores fluorescentes de puntos cuánticos. Los dispositivos MEMS (Sistemas Micro Electromecánicos) son usados como acelerómetros en las bolsas de aire de los automóviles. Los componentes incluyen, nanomateriales, moléculas orgánicas Semiconductoras, polímeros y materiales y químicos de alta pureza.

4. MODELOS Y SIMULACIÓN

4.1. Modelos

Las propiedades de los dispositivos a una nanoescala en grandes ambientes deben ser modeladas. Este modelado probablemente tiene que cruzar diferentes escalas de medida (escalas moleculares, nano, micro entre otras) desde la idea inicial de fabricación hasta que el dispositivo este funcionando correctamente, debido a que no se puede pensar solo en partes individuales. Los dispositivos a una nanoescala deben modelarse en el contexto de su ambiente. En electrónica, por ejemplo, se tiene el siguiente patrón de progreso del modelado, suponiendo un incremento de la complejidad inherente al modelo en cada etapa.

Materiales → Dispositivos → Circuitos → Sistemas → Arquitecturas.

Para continuar avanzando en una nanoescala, algunas áreas necesitan usar matemáticas avanzadas en teorías a microescala y métodos de multiescala. La complejidad molecular necesita también nuevos métodos para la optimización de estructuras complejas, que se usarán por ejemplo, en la predicción del auto ensamblado de nanomateriales.

Las herramientas de modelado que se usan son: la meso – escala (una capacidad de resolución intermedia de funcionamiento entre las escalas atómica y micro), la atomística clásica (la teoría clásica de campos de fuerza), la Teoría de la Densidad Funcional (una aproximación de un electrón de la teoría cuántica, donde un electrón interactúa con los átomos pero no con otro electrón), y el modelo cuántico completo (electrones que interactúan con otros electrones y los iones de cuatro o cinco entre sí).

Estos diferentes métodos deben trabajar juntos, además deben ser fáciles de usar por mucha gente, de manera que se mejore todo el diseño del dispositivo. Los resultados con la exactitud correcta y la incertidumbre prevista, deben servir además de otra teoría y otros cálculos matemáticos, para tal objeto. La resolución

colaborativa de problemas, a través de bases de datos compartidas, hacen posible a los investigadores en áreas geográficas muy distantes, trabajar en los mismos problemas y así desarrollar un conjunto colaborativo de teorías y software. Con un mayor interés en la simulación, la nanotecnología va a tener una nueva herramienta. Donde las computadoras paralelas masivas y el software avanzado incrementen las capacidades de la simulación. Estas supercomputadoras facilitan el modelado y la simulación a gran escala, para que la nanotecnología avance hacia la resolución de problemas reales.

4.2. Simulación

Durante los últimos 20 años, el cómputo se ha convertido en una tercera forma de hacer ciencia, que complementa la teoría y la experimentación. Las simulaciones son necesarias para probar y comprender completamente diferentes diseños, utilizando la nanotecnología, una ciencia emergente en el que los nuevos materiales y estructuras pequeñas se construyen átomo por átomo o molécula-molécula.

Hay una necesidad de un trabajo de cálculo en cualquier campo, pero sobre todo en un campo en el que están explorando completamente nuevos tipos de dispositivos y estructuras.

Científicos de todo el mundo están sintetizando, caracterizando y manipulando estructuras nanoescalares. Donde se ofrece un amplio rango de oportunidades para la ciencia aplicada, su trabajo también se ocupa de cuestiones experimentales. Debido a que los datos se almacenan en una nanoescala, la mayoría de las medidas no se pueden interpretar sin haber creado primero un modelo matemático de la interacción entre la herramienta de medición y los materiales o estructuras medidos.

Por ejemplo, un modelo teórico quizás necesite definir la interacción o la ubicación de neutrones o nanopartículas de un átomo. O se quiera entender los datos de microscopio atómico moviéndose a través de una superficie, un modelo será necesario para mostrar la interacción entre el microscopio y las moléculas de la superficie.

Para obtener una alta reproducibilidad (la habilidad de repetir un proceso científico y obtener los mismos resultados) y un producto de calidad en materiales nanoestructurados, se deben considerar muchas variables. En procesos como la fabricación del vino o la fabricación de un biochip, los efectos de la temperatura, presión, tiempo y concentración son críticos.

Estudios por ejemplo en el modelado teórico o computacional de la química y la física son áreas de estudio claves para determinar la mecánica cuántica atómica del movimiento de un electrón. Los científicos simulan el comportamiento espacial de una molécula o un átomo, examinando y prediciendo las fuerzas entre y alrededor de ellos.

La nanotecnología ofrece la oportunidad de unir complejas nanopartículas y materiales que se pensaban eran incompatibles. Por ejemplo superficies inorgánicas como el oro, se pueden unir con moléculas orgánicas.

Como es esto posible, la respuesta esta en el tamaño, una vez mas esto demuestra que se pueden manipular nanopartículas para producir nuevos materiales.

5. APLICACIONES

5.1. LabVIEW SignalExpress

LabVIEW SignalExpress de National Instruments, es un entorno interactivo basado en la plataforma de diseño gráfico de sistemas NI. LabVIEW es líder en la industria, y hace posible el aprendizaje práctico y experimental de la nanotecnología para estudiantes, a través de múltiples disciplinas desde la ingeniería biomédica a la ingeniería aeroespacial, y a través de múltiples niveles desde principiantes hasta expertos con un enfoque paso a paso e interactivo. Ya que NI LabVIEW SignalExpress se puede conectar a miles de dispositivos e interfaces de varios buses como USB, GPIB o serial, los estudiantes e investigadores pueden usarlo en los laboratorios para una variedad de aplicaciones. Con LabVIEW SignalExpress, ahora pueden realizar análisis de manera interactiva mientras el sistema se está ejecutando y personalizar sus algoritmos rápida y fácilmente.

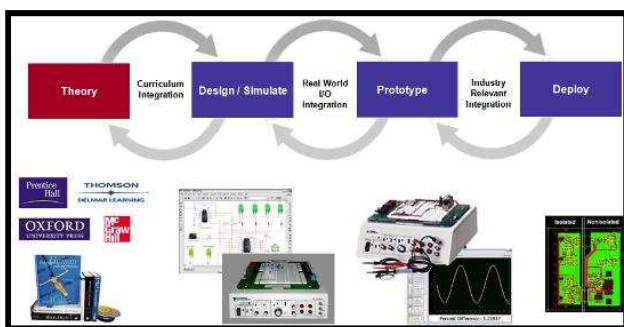


Figura 2. Entorno integrado de LabView Signal Express.

5.2. nanoHUB

NanoHUB provee una simulación en línea de mas de 160 herramientas. Todas estas herramientas corren como applets en la ventana de su navegador, pero además provee un middleware capaz de ubicar recursos transparentemente en diferentes centros de investigación sobre nanotecnología. Algunos la describen como una Infraestructura de Cloud Computing y un Almacén de Aplicaciones para la nanotecnología similar a Apple iTunes. Para poder efectuar las simulaciones, se debe primero registrarse y así obtener un nombre de usuario y una contraseña valida. El registro es gratuito.

La mayoría de las herramientas de nanoHUB son contribuciones de la investigación en áreas de la nanoelectrónica, nanomecánica, nanobiología, nanofotónica y muchas otras.

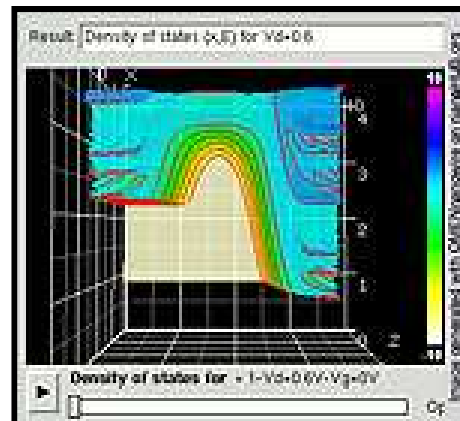


Figura 3 Pantalla Experimental de nanoHUB.

5.3. MATERIALS STUDIO

Las herramientas MATERIALS STUDIO tienen una aplicación en diferentes áreas de la nanotecnología como ser, nanotubos de carbono, sensores químicos, cristales líquidos, optoelectrónica, materiales nanocompuestos, polímeros nanoestructurados, recubrimientos, liberación de fármacos. Presenta herramientas para cubrir las necesidades de modelado tanto para investigaciones en "materiales blandos" como en "materiales duros". Alternativamente, es posible configurar un conjunto de herramientas personalizadas seleccionando entre los módulos MATERIALS STUDIO métodos ab initio y semiempíricos de mecánica cuántica, mecánica clásica y simulaciones a meso – escala.

6. CONCLUSIONES

El estudio y aplicación de la nanotecnología, esta permitiendo la apertura de un nuevo mercado y de nuevas áreas de investigación y desarrollo, donde debido principalmente a la incapacidad de observar procesos y estructuras a nanoescala, se recurre a el modelado y a la simulación de las diferentes nanoestructuras, nanomateriales o incluso nanodispositivos. Sin embargo un hecho que todavía interfiere este proceso, es el grado de abstracción necesario en los modelos, puesto que estos requieren matemáticas muy avanzadas. Sin embargo como todo, en la informática esto dejara de ser un problema cuanto mas se avance en el estudio de los modelos y simulación en nanotecnología..

7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Brune, H. Nanotechnology Assessment and Perspectives. 2006. Springer. Alemania.
- [2] Garcia, L. Simulación de Nanoestructuras. 2008. [Disponible en:] <http://blogs.creamoselfuturo.com/nanotecnologia>. [Fecha de búsqueda:] 07/10/10.
- [3] LabVIEW SignalExpress para Enseñanza e Investigación. 2010. [Disponible en:] <http://zone.ni.com/devzone/cda/tut/p/id/5800>. [Fecha de búsqueda:] 07/10/10.
- [4] Levy, A. Nanotecnología. 2006. [Disponible en:] <http://www.thezilus.com/blog/nanotecnologia>. [Fecha de búsqueda:] 07/10/10.
- [5] Merkle, R. Nanotechnology: It's a Small, Small, Small, Small World. [Disponible en:] <http://www.actionbioscience.org/newfrontiers/merkle.html>. [Fecha de búsqueda:] 07/10/10.
- [6] Nanomaterials. 2010. [Disponible en:] <http://www.sigmaaldrich.com/materials-science/nanomaterials/tutorial.html>. [Fecha de búsqueda:] 05/10/10.
- [7] Nanotecnología. 2000. [Disponible en:] http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia/recursos_docentes/recursos.htm. [Fecha de búsqueda:] 10/10/10.
- [8] Sáenz, J. Teoría, Modelado y Simulación en Nanociencia en Nanociencia en España. 2008. [Disponible en:] <http://t3innovacion.larioja.org/uploads/media/NanocienciaEnEspana.pdf>. [Fecha de búsqueda:] 10/10/10.
- [9] Simulate. 2009. [Disponible en:] <http://www.nanohub.org>. [Fecha de búsqueda:] 10/10/10.
- [10] Soluciones MATERIALS STUDIO para Nanotecnología. 2010. [Disponible en:] <http://www.addlink.es>. [Fecha de búsqueda:] 05/10/10.
- [11] Williams, L. Adams, W. Nanotechnology Demystified. 2007. McGraw Hill. EEUU.