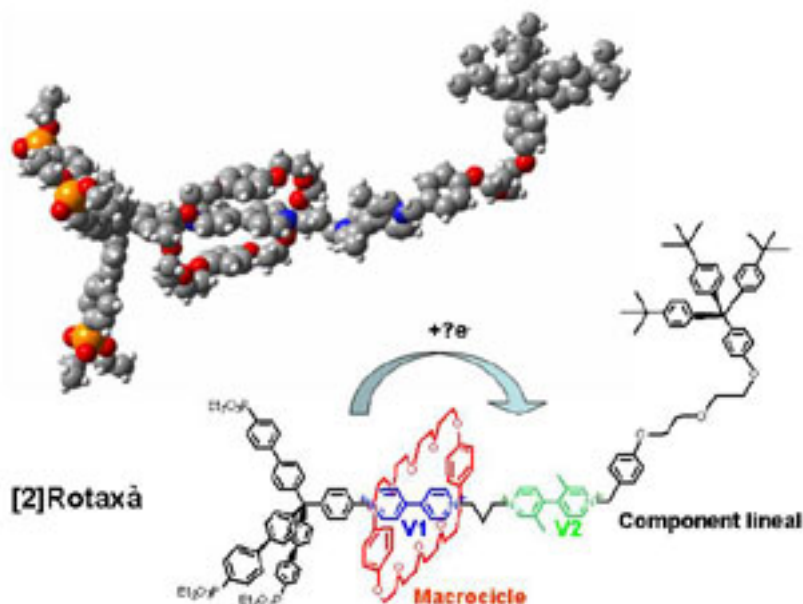


# Nanomolècules "computeritzades"

05/2008 - **Química.** Molts dels materials i sistemes funcionals creats a partir de nanotecnologia estan basats en molècules, com per exemple els [2]rotaxans, que presenten unes propietats físiques i químiques potencialment útils en informàtica i en medicina. Aquesta tesi desenvolupa i utilitza una potent estratègia computacional per modelar amb molta eficàcia un [2]rotaxà que va ser sintetitzat i caracteritzat experimentalment a la University College de Dublin, a Irlanda.



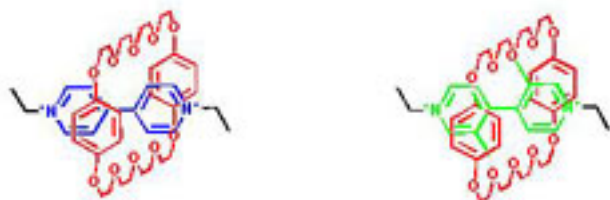
**Figura 1.** Representació del [2]rotaxà sense reduir estudiat en aquesta tesi. Aquest [2]rotaxà està format per un eter corona (macrocicle) i un component lineal que conté dues estacions de bipiridina (V1 i V2). El salt de l'anell pot tenir lloc després de reduir les estacions.

La nanotecnologia - l'estudi, disseny, síntesi, manipulació i aplicació de materials i sistemes funcionals a nano escala (1-100 nm) - ha suposat un gran avenç en moltes indústries i la creació de nous materials amb propietats extraordinàries i amb múltiples aplicacions, principalment en informàtica i medicina.

Molts d'aquests materials i sistemes funcionals estan basats en molècules, com per exemple els [2]rotaxans, que presenten unes propietats físiques i químiques molt interessants. Aquestes molècules estan formades per una cadena lineal, envoltada per un macrocicle, que conté dos grups molt voluminosos que eviten la sortida de l'anell. La molècula lineal pot tenir una, o més d'una, zona anomenada estació que pot interaccionar amb el macrocicle. Aquesta interacció es pot alterar, mitjançant un estímul extern (com per exemple, oxidant o reduint les estacions, modificant la temperatura o el pH) i com a conseqüència, podem fer variar la posició de l'anell a la cadena. En el cas de poder controlar el moviment del macrocicle, ens permet utilitzar aquestes molècules en la fabricació de dispositius electrònics i màquines moleculars (transistors moleculars, portes lògiques, dispositius de memòria, circuits, nanovàlvules, ascensors moleculars).

En aquesta tesi doctoral s'ha desenvolupat i utilitzat una potent estratègia computacional per a l'estudi d'un [2]rotaxà que va ser sintetitzat i caracteritzat experimentalment pel grup de Nanoquímica de la University College Dublin, a Irlanda. La reducció d'aquest [2]rotaxà permet modular la posició de l'anell (Fig. 1). En una primera aproximació, es van estudiar uns pseudorotaxans - supramolècules formades per una cadena lineal sense grups bloquejadors que s'insereix en un macrocicle - formats per les mateixes estacions que presentava el [2]rotaxà en cada etapa de la reducció (Fig. 2). Es va modelitzar el comportament dels pseudorotaxans en diferents dissolvents ( $\text{CH}_3\text{CN}$  i  $\text{CH}_3\text{OH}$ ) i amb la presència de dos tipus de contraions ( $\text{PF}_6^-$  i  $\text{Br}^-$ ). Es va voler aprofundir en el coneixement de les interaccions entre el macrocicle i les estacions i es va observar que aquestes interaccions són cada cop menors a mesura que anem reduint les estacions.

Els resultats obtinguts amb els [2]pseudorotaxans reproduïen perfectament el comportament del macrocicle en cada procés de reducció del [2]rotaxà trobat de manera experimental i permet fer ús de la metodologia utilitzada a l'hora de dissenyar i estudiar el comportament de nous [2]rotaxans.



**[2]Pseudorotaxans**

Javier Pérez Mirón

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona. Facultat de Ciències i Biociències.

"Molecular Modelling of Switchable [2]Rotaxanes". Tesi doctoral dirigida per Carlos Jaime Cardiel i presentada per Javier Pérez Mirón el 14 de març de 2008 a la Facultat de Ciències i Biociències.