

Ordenadores Moleculares. Una realidad próxima?

El desarrollo de los Microprocesadores ha seguido desde hace cuatro décadas la archifamosa ley de Moore, que establece que la cantidad de transistores que componen un microprocesador (y por ello su capacidad de proceso), se duplica cada aproximadamente 18 meses

Pero este crecimiento exponencial debiera tener un límite debido al tamaño cada vez más reducido de los componentes del correspondiente circuito integrado.

Este límite está hoy en el orden de los 0,18 micrones, con una tecnología que permite unos 100 millones de transistores en un chip de algunos pocos cm^2 .

Un chip "del estado del arte", operando a 500 MHz puede llegar a disipar del orden de 10^2 vatios, una enorme potencia que impone límites serios a los ordenadores portátiles y aproxima peligrosamente la tecnología del silicio a sus límites prácticos.

Aunque existen intentos de reducir estos requisitos de potencia mediante técnicas bastante ingeniosas (ver por ejemplo el artículo sobre Crusoe, Nueva Arquitectura de Microprocesador), aun así estaríamos muy lejos de disponer de chips capaces de acercarse siquiera a las necesidades de la inteligencia artificial para la robótica, (una de las aplicaciones de los microprocesadores con un futuro muy importante), sin exceder las posibilidades de fabricación y menos aún los de portabilidad.

Por esta y otras razones, los investigadores se esfuerzan desde hace años en desarrollar nuevos circuitos que realicen las operaciones básicas de cálculo mediante dispositivos que no sean a escala macroscópica sino a escala molecular.

En los últimos cinco años se han realizado progresos muy importantes, que permiten entrever un posible futuro en el que se podría reducir el tamaño de los circuitos en el orden de un millón de veces.

Estos avances, a diferencia de la técnica de fabricación de la microelectrónica actual que es principalmente la fotolitografía de gran precisión, están basados esencialmente en la química orgánica para la obtención de moléculas con características adecuadas para la construcción de circuitos lógicos.

Moléculas prometedoras para la fabricación de circuitos lógicos.

Actualmente se exploran las posibilidades de varias familias de moléculas, pero las más prometedoras parecen ser las derivadas de los hidrocarburos aromáticos (específicamente el benceno) y los nanotubos de carbono (también llamados fulerenos o buckytubes).

Fulerenos o nanotubos de carbono

Los Fulerenos tienen características muy prometedoras, pero por diversas razones no se han desarrollado todavía suficientes aplicaciones prácticas. Es en cierto modo una de esas tecnologías en busca de una aplicación que la haga despegar. Pero esta situación puede cambiar radicalmente a corto plazo.

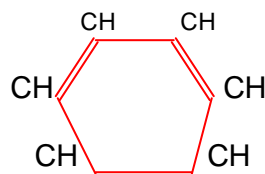
Su uso en circuitos lógicos moleculares podría ser ese factor, pero aún requiere mucha investigación, sobre todo en las técnicas de producción de moléculas homogéneas y repetibles.

Por estas razones nos concentraremos en la otra familia de moléculas con gran potencial, los polifenilenos.

Dispositivos electrónicos a escala molecular basados en Polifenilenos.

El benceno, un compuesto orgánico aromático con un anillo exagonal de carbono e hidrógeno es un componente importante de las nuevas gasolinas “verdes”, por lo que podría decirse que substituye al plomo como contaminante del aire de nuestras ciudades. Pero también tiene propiedades mucho más positivas, ya que es la base de una serie de moléculas con las propiedades eléctricas necesarias para implementar los circuitos básicos del cálculo binario. Veamos algunos de estos compuestos:

La fórmula del benceno es C₆H₆, con la estructura indicada en la figura:



Si se elimina uno de los átomos de hidrógeno se transforma en un “grupo fenil”, con fórmula CH₅ y si se eliminan 2 átomos (obteniendo CH₄) tenemos un “grupo fenileno”.

Estos grupos disponen respectivamente de uno o dos sitios en el anillo para combinarse con otras moléculas. Si combinamos dos grupos fenilenos en línea y terminamos cada extremo con un grupo fenil, obtenemos un “polifenileno”, que constituye a su vez la base para una gran familia de moléculas con un potencial práctico importante.

Para que una molécula tenga aplicaciones en electrónica, debe ser capaz de conducir corriente de manera efectiva y los polifenilenos cumplen este requisito de manera casi asombrosa.

La tabla siguiente muestra un resumen de los resultados obtenidos por Reed y colaboradores al pasar una corriente eléctrica por una monocapa de aproximadamente 1000 “alambres” de polifenileno y su comparación con la conductividad de otros materiales:

Parámetro	Polifenileno de tres anillos	Nanotubo de Carbono	Alambre de cobre
Tensión aplicada (V)	1	1	2×10^{-3}
Sección de conducción estimada por molécula	$0,05 \text{ nm}^2$	$3,1 \text{ nm}^2$	$3,1 \times 10^{12}$
Densidad de corriente electrones por seg-nm ²	2×10^{12}	2×10^{11}	2×10^6

Cabe aclarar que las corrientes medidas son extremadamente pequeñas (del orden de 10^{-8} A), pero el área de conducción es tan pequeña (del orden de 5 centésimas de nanometro) que la densidad de corriente de un “alambre” de polifenileno resulta 6 órdenes de magnitud mayor que el cobre.

Recordando que la carga eléctrica del electrón es de $1,6 \times 10^{-19}$ Coulomb, resulta que por el “alambre” están circulando unos 200 mil millones de electrones por segundo.

Estos “alambres” han sido fabricados por Tour mediante técnicas de síntesis orgánica, obteniendo una enorme cantidad de cadenas de moléculas de polifenilos (del orden de 10^{23}), todas con las mismas características, por lo que estas estructuras se conocen como “alambres de Tour”.

La conductividad de estas cadenas se explica mediante la teoría de las órbitas moleculares “pi-conjugadas”, cuyo detalle escapa al nivel de este artículo, pero que básicamente consisten en la superposición de órbitas de electrones que ocupan una “capa” a lo largo de toda la molécula, por encima y por debajo del plano que forman los anillos de la cadena.

Estas órbitas “pi” son afectadas fuertemente por las distorsiones del plano que ocupa la molécula, lo que brinda un posible mecanismo de control de la conductividad de la cadena mediante la modificación eléctrica de este plano. Por otra parte, la deseable planicidad de la cadena se logra mediante la inserción de grupos específicos (acetilénicos) entre los anillos de fenil de la cadena.

Pero para poder construir circuitos eléctricos moleculares, se debe también disponer de aisladores, resistores y elementos alineales (diodos y transistores).

Las moléculas de polifenilos también permiten la construcción de estos elementos. Así, las moléculas denominadas “alifáticas” (por ej. CH_2 ó $\text{CH}_2\text{—CH}_2$) forman barreras cuando se insertan entre los anillos de la cadena.

Los circuitos de más interés son los que presentan características alineales, pudiendo constituir interruptores a diodo de dos terminales (y se espera que más adelante también transistores de tres terminales).

Recientemente se han demostrado dos tipos de diodos a escala molecular: los diodos rectificadores y los diodos túnel resonantes (RTD)

No entraremos en detalle de cómo se obtienen estas estructuras, diremos solamente que se trata de diseños basados en moléculas de polifenilos “dopadas” con elementos “donores” y “aceptores”, con alguna similitud con a la teoría de los semiconductores cristalinos. Se remite al lector interesado al trabajo de Ellenbogen y Love, referenciado al final de este artículo.

Más importante nos parece el resaltar que al disponer de elementos conductores, aisladores, resistores y diodos rectificadores o tipo túnel, sería muy posible construir los análogos moleculares de los componentes básicos de la lógica binaria: AND, OR, XOR, NOT y sus derivados HALF ADDER y FULL ADDER.

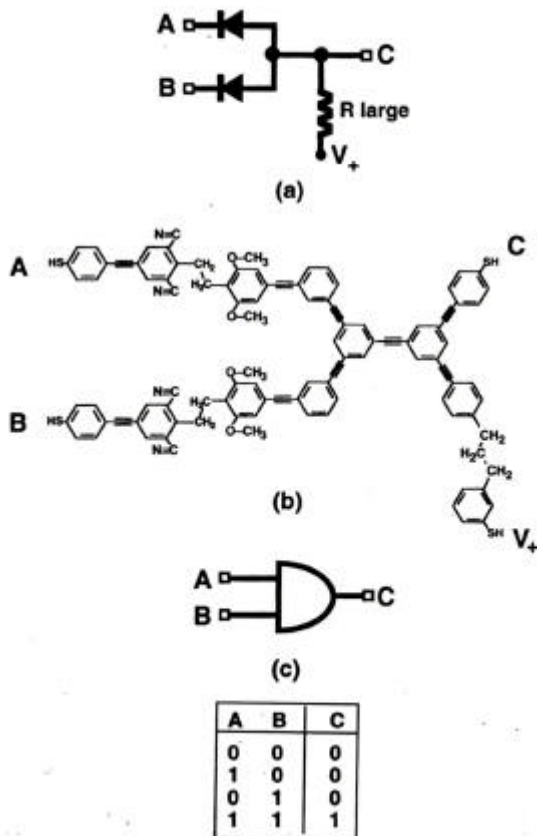
Un requisito importante para esto sea posible es que las moléculas de cada módulo lógico puedan “conectarse”, es decir combinarse de una manera controlada con las demás moléculas del circuito. Afortunadamente esto es posible en el caso de las cadenas de polifenilos, que son bastante reactivas. Pero existen algunos problemas importantes debidos a la topología de estas estructuras, que se agravan a medida que se vuelven más complejas.

Por ejemplo, es posible desde el punto de vista topológico “conectar” las dos entradas de los circuitos AND OR y XOR a los anillos correspondientes sin que se “cruzen” las

conexiones, pero ya en el circuito HALF ADDER es necesario recurrir a “puentes” moleculares tridimensionales para evitar estos cruces.

La construcción de estos “puentes” por medio de la síntesis química de la molécula presenta dificultades y no está claro que puedan resolverse para las moléculas de mayor complejidad.

En la figura siguiente se muestra un ejemplo de circuito un AND molecular, tomado del trabajo de Ellenbogen y Love.



Asimismo subsisten muchos otros problemas de diversa índole que parecen indicar que no dispondremos de circuitos prácticos antes de unos 10 años.

Pero este es un plazo que entra ya en lo razonable y la gran presión que soporta hoy la tecnología convencional de la fotolitografía para producir circuitos cada vez más densos a un coste razonable, puede hacer volcar una parte de los enormes recursos actualmente utilizados para mantener el ritmo de crecimiento de la tecnología convencional hacia las nuevas tecnologías, acelerando su desarrollo comercial.

De no ser así, es posible que la hasta ahora inexorable Ley de Moore deje de cumplirse por razones tecnológicas y/o de costes y que nos veamos de repente atascados en el desarrollo de nuevas aplicaciones más exigentes.

Una reflexión sobre la velocidad de cálculo requerida por los circuitos.

Uno de los paradigmas actuales del desarrollo de los microprocesadores es “cada vez mayor capacidad, cada vez mayor velocidad”.

Como vimos antes, esto trae aparejado una inevitable “mayor disipación de potencia”, una característica muy indeseable no solo porque limita la portabilidad de los dispositivos (un requisito importante en la futura robótica “inteligente”), sino también porque ya los niveles actuales de disipación de calor exigen ya hoy el operar con ventilación forzada permanente y a temperaturas al límite de la tecnología del silicio.

Pero cabe preguntarse si esta es la única forma de hacer las cosas y nos parece evidente que no es así.

Si observamos cómo están contruidos los más grandes ordenadores del mundo, vemos que se trata de máquinas que operan en paralelo, haciendo trabajar simultáneamente una gran cantidad de procesadores de capacidad y velocidad relativamente limitada.

Si pensamos en el ordenador más poderoso que existe (hasta ahora), el cerebro humano, tenemos una estructura sumamente pequeña, con un consumo de energía muy moderado pero que es capaz de realizar unos 100 millones de MIPS (millones de operaciones por segundo), a pesar que los circuitos neuronales biológicos que lo componen son muy lentos en comparación. Esta enorme capacidad es equivalente a unos 100.000 procesadores Pentium operando en paralelo

Una de las razones de esta enorme eficiencia está en su masiva operación en paralelo, lo que nos lleva a la posibilidad futura de imitar en parte este tipo de estructura mediante circuitos lógicos moleculares, cuyo tamaño es apropiado y el consumo de energía es muy reducido (se estima en unos 50 pw por molécula).

Los circuitos moleculares por su parte no son excesivamente rápidos, si los comparamos con procesador tipo Pentium actual, pero son aproximadamente 1 millón de veces más pequeños.

Si pudiéramos emplear el equivalente molecular a unos 100.000 Pentiums en paralelo, ocuparíamos un a minúscula área de unos 10 micrómetros de lado, con una capacidad de cálculo resultante del mismo orden de la del cerebro humano.

Claramente se trata por ahora de una especulación científica que requerirá resolver enormes problemas de Implementación y casi con seguridad el descubrimiento de nuevas técnicas innovadoras.

Pero por primera vez se asoma en el horizonte de nuestro acelerado desarrollo tecnológico la posibilidad de disponer de circuitos electrónicos de tamaño y consumo razonables, con una capacidad similar a nuestros cerebros.

Tales complejísimos circuitos, sujetos muy probablemente a las fluctuaciones cuánticas, podrían tal vez experimentar cierto grado de conciencia?

Nadie puede responder hoy a ello, pero no es una posibilidad a descartar, sobre todo si atendemos a las teorías sobre la conciencia de Roger Penrose (ver por ejemplo su libro “Las sombras de la Mente”, sobre todo su segunda parte).

Entonces sí que estaríamos en el umbral de una realidad totalmente diferente, conviviendo con inteligencias artificiales que al fin podrían comparársenos.

Es esto posible? Creo que la respuesta depende más de nuestras propias convicciones que de una verdad científica.

Al fin y al cabo, no estamos también nosotros constituidos de átomos de Carbono, Hidrógeno, Oxígeno, Nitrógeno y pocas cosas más?

Eso sí, muy pero muy bien organizados....

Para los que desean saber más:

Architectures for Molecular Electronic Computers, James C. Ellenbogen y J. C. Love, Proceedings of the IEEE Vol 88 N° 3, Marzo 2000

Las sombras de la Mente, Roger Penrose Ed. Crítica, 1996

Computing with Molecules, M. A. Reed y J. Tour. Scientific American, Junio 2000 (hay edición en español).

Enlaces de interés:

www.mitre.org (usar "search" nanosystems)

www.ieee.org (usar search Proceedings of the IEEE)

www.sciam.com