

Visionarios, videntes, visualizadores y veedores de moléculas

Santiago Álvarez

Resumen: Si viéramos las moléculas como vemos los engranajes de un reloj, y tuviéramos la manera de manipularlas, podríamos encajar las piezas en un dispositivo molecular, igual que un experto monta un mecanismo de relojería. Los seres humanos hemos visto las moléculas desde diversas perspectivas, incluyendo la de los artistas, los químicos cuánticos o los videntes, aunque durante la mayor parte del siglo XX nuestras mejores fotos las hemos obtenido por difracción de rayos X. En los últimos años se han desarrollado una serie de técnicas microscópicas y espectroscópicas que nos acercan cada vez más a la figura del relojero molecular.

Palabras clave: Representación molecular, microscopía electrónica, microscopía de fuerza atómica (AFM), microscopio de barrido de efecto túnel (STM), espectroscopía.

Abstract: If we could see molecules in the same way we see the gears of a watch, and if we could manipulate them, we should be able to fit the bits and pieces of a molecular device much in the same way a watchmaker assembles a clockwork. We human beings have seen molecules from a variety of perspectives, including those of the artists, the quantum chemists or the clairvoyants. However, for most of the XXth century our best photographs have been obtained by means of X ray diffraction. In recent years a series of microscopic and spectroscopic techniques have been developed that take us closer and closer to the dream of the molecular watchmaker.

Keywords: Molecular representations, Electron microscopy, Atomic force microscopy (AFM), Scanning tunneling microscope (STM), Spectroscopy.

Una molécula se puede ver de diversas formas, según la mire un visionario, un vidente, un visualizador o un veedor. La palabra *visionario* se puede aplicar aquí bajo una de sus dos acepciones, ya sea aquella persona que, por su fantasía exaltada, se figura y cree con facilidad cosas quiméricas, o bien alguien que se adelanta a su tiempo o tiene visión de futuro. Vidente es la persona que adivina el porvenir o conoce cosas ocultas. Visualizar es representar mediante imágenes ópticas fenómenos de otro carácter, formar en la mente una imagen visual de un concepto abstracto, imaginar con rasgos visibles algo que no se tiene a la vista o, dentro del mundo de la informática, hacer visible una imagen en un monitor. Por último, veedor es aquél que ve, mira o registra con curiosidad (las acciones de los otros), si bien el uso ha ido generando por esta palabra acepciones que hacen referencia a diversos oficios cuya característica más destacada es la observación, la supervisión o la inspección.

En cualquier caso, utopía, quimera o entequeia, la imagen molecular ha constituido desde antiguo un objetivo al que han prestado su atención científicos, filósofos, videntes y artistas. Pero, ¿podemos ver las moléculas? ¿Qué queremos decir cuando hablamos de ver? Si consideramos la primera acepción del diccionario de la RAE, "percibir por los ojos objetos mediante la acción de la luz", está claro que no podemos –y seguramente no podremos– verlas, al menos si entendemos que el diccionario se refiere a la luz visible.

En realidad no vemos sólo con los ojos, sino, sobre todo, con el cerebro. La información luminosa que captan nuestros ojos

es transmitida al cerebro, que reconstruye las características físicas del objeto visto: posición, tamaño, forma, color y textura. Ello implica que sólo podremos decir que vemos moléculas cuando consigamos reconocer estas cinco características. En caso contrario, más que verlas, estaríamos entreviéndolas.

Para no remontarnos a *De Rerum Natura* de Lucrecio (siglo I aC) y su visión de átomos con ganchos y agujeros, empecemos con un visionario más reciente, Marc-Antoine Gaudin. Éste, en 1873, poco después de que Kekulé viera en sueños la molécula de benceno y un año antes de que Van 't Hoff y Le Bel establecieran la geometría tetraédrica de los átomos de carbono en las moléculas orgánicas, escribía:^[1]

[...] si tan solo pudiera ver una molécula, aún la más sencilla, la textura de todas las demás se derivaría directamente; pero, puesto que esto es absolutamente imposible, lo mejor que se puede hacer es razonar sobre la posible disposición de los átomos en las moléculas más simples.¹

Una visión diferente de moléculas, obtenida sin ayuda de instrumental científico, apareció a principios del siglo xx, cuando Besant y Leadbeter optaron por la videncia para conocer la estructura íntima de los elementos químicos, y recogieron los resultados de sus observaciones en el libro *Occult Chemistry*.^[2] Así explicaban su técnica:

Había descubierto que estas facultades [la clarividencia], ejercidas en la dirección apropiada, eran ultramicroscópicas. Una vez se me ocurrió preguntarle al Sr. Leadbeter si él pensaba que realmente podría ver una molécula de materia física. Él se mostró dispuesto a intentarlo, y yo sugerí que observara una molécula de oro [sic].

El resultado, la forma de las "moléculas" de oro, se muestra en la Figura 1.

El físico alemán Ernst Abbe estableció en 1873 que la difracción de la luz supone un límite a la resolución que la



S. Álvarez

Departament de Química Inorgànica e
Institut de Química Teòrica i Computacional,
Universitat de Barcelona,
Martí i Franquès 1-11, 08028 Barcelona.
C-e: santiago@qi.ub.es
Recibido: 14/01/2009. Aceptado: 02/02/2010.

¹*[...] si je pouvais seulement voir une seule molécule, même la plus simple, la texture de toutes les autres en découlerait nécessairement; et puisque la chose est absolument impossible, ce qu'il y a de mieux à faire est de raisonner sur l'arrangement possible des atomes dans les molécules les plus simples.*

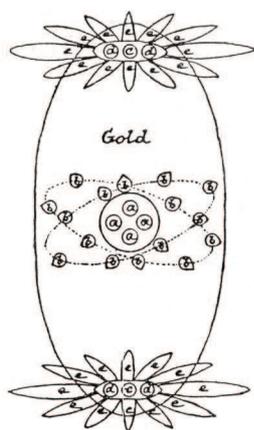


Figura 1. Descripción gráfica de la imagen de la "molécula" de oro obtenida mediante videncia por Besant y Leadbeter.

microscopía óptica podría alcanzar.^[3] Sabiendo que ese límite es del orden de unos 200 nm para la luz visible, habíamos renunciado a ver las moléculas con un microscopio de forma parecida a como vemos tejidos y células. Por ello comentaré aquí sobre todo otros tipos de técnicas de visionado molecular: de difracción, espectroscópicas y otras microscopías. Cabe apuntar, no obstante, que desarrollos recientes en óptica han permitido romper la barrera de la difracción propuesta por Abbe, de manera que nuevas generaciones de microscopías ópticas (identificadas con siglas como STED, PALM, FPALM o STORM) pueden llegar en estos momentos a resoluciones de unos 20 nm.^[4] Todavía un poco lejos de lo que necesitaríamos para ver claramente moléculas, aunque de gran utilidad en biología.

Durante el siglo XX, se desarrollaron de forma espectacular las técnicas de difracción de rayos X o de neutrones que nos han permitido visualizar con gran detalle una buena porción de moléculas. Hoy tenemos al alcance de nuestros ordenadores toda la información sobre la disposición aparente de los átomos en unas ochocientas mil sustancias, incluidos medio millón de compuestos moleculares orgánicos e inorgánicos,^[5] sesenta mil proteínas,^[6] unos doscientos mil sólidos metálicos o iónicos (como óxidos o haluros).^[7] Más recientemente hemos sido capaces, mediante estas técnicas, incluso de fotografiar moléculas en estados excitados que perviven apenas unos milisegundos,^[8] y ver la forma que adoptan desde que absorben un fotón hasta que consiguen deshacerse del exceso de energía re-emitiendo luz o transformándola en energía vibracional. La información cristalográfica de todas esas sustancias, guardadas como paquetes de números en eficientes bases de datos, las podemos representar en las pantallas de nuestros ordenadores gracias a programas de visualización que nos dan generalmente una imagen esquemática de una realidad más compleja cuyas formas, determinadas por la distribución de la densidad electrónica, son seguramente más suaves y esponjosas.

Linus Pauling, uno de los primeros en aplicar la difracción de rayos X a la determinación de estructuras moleculares, consiguió del artista Roger Hayward unas ilustraciones de formas moleculares^[9] como objetos con contornos redondeados, mórbidos, casi como ositos de peluche (Figura 2, izquierda). Paradójicamente, la versión artística de Hayward y Pauling es mucho más realista que las representaciones cristalográficas usuales (Figura 2, centro), que muestran de

forma simplificada los átomos como esferas y los enlaces químicos como varillas, aunque los programas de visualización también nos permiten obtener imágenes menos esquemáticas (Figura 2, derecha).

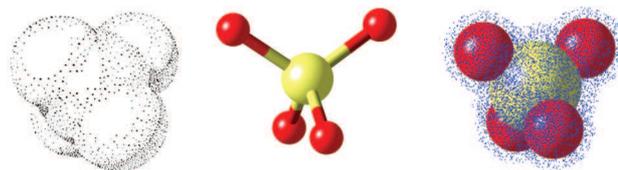


Figura 2. Representación artística del ión perclorato debida a Roger Hayward y Linus Pauling (izquierda), versión de esferas y varillas que suelen mostrar los programas de visualización molecular (centro) y versión de esferas compactas con una superficie de van der Waals obtenida con el mismo programa (derecha).

A pesar de que las técnicas de difracción nos han proporcionado una información valiosísima para la comprensión de las propiedades y reacciones de numerosas sustancias, no están exentas de limitaciones. Una de las más importantes es que la información que nos proporcionan corresponde a un promedio de las estructuras individuales de las numerosísimas moléculas presentes en la muestra, una idealización razonable pero no siempre correcta. Como en el cuadro *Un regimiento en marcha*, pintado por Josep Cusachs (Figura 3), en el que todos los soldados llevan casacas azules, cascos idénticos y... la misma cara.



Figura 3. Detalle de *Un regimiento en marcha*, de Josep Cusachs, óleo sobre tela (1892). Reproducido por cortesía del propietario de la obra, Museu de Montserrat – Abadía i Santuari de Montserrat.

Otra limitación importante de esas técnicas durante décadas fue que sólo se podían aplicar a un material sólido en forma de monocristal, con unas dimensiones de al menos una décima de milímetro. A los químicos en cambio, nos resulta más fácil obtener sólidos en forma de polvos policristalinos, en que cada grano es un cristalito demasiado pequeño para un estudio estructural. Esa limitación se puede superar en algunos casos, mediante experimentos de difracción sobre polvos, aplicando métodos directos de resolución estructural^[10] y un ajuste de Rietveld. En la práctica, entre las estructuras moleculares que conocemos, sólo tres de cada mil han sido determinadas a partir de polvos. En el resto de los casos se ha trabajado con un monocristal.

Con el advenimiento de instalaciones que generan pulsos láser de rayos X de electrones libres (XFEL) en California, Japón y Alemania, se espera llegar a hacer experimentos de difracción de objetos unimoleculares.^[11] A diferencia de técnicas como la cristalografía o la tomografía, que implican la realización de múltiples mediciones variando la orientación de la muestra, o como la microscopía confocal, que requiere

barridos sobre diversas secciones de la muestra, el uso de XFEL ha de permitir obtener en una única imagen toda la información que lleva a reconstruir la estructura tridimensional del objeto estudiado. Ello se consigue recogiendo toda la radiación difractada simultáneamente en un detector semi-esférico. Por eso se ha bautizado esta técnica como *anquilografía*, de las palabras griegas *ankylos* (curvo) y *graphos* (escribir, describir).^[12]

En la segunda mitad del siglo XX las estructuras de rayos X no han desbancado del todo otras formas de ver moléculas. Visionarios o videntes, los miembros del grupo Troubled Hubble, inspirados por quién sabe qué moléculas, cantan así en *I'm pretty Sure I can see Molecules* (2003):

*Veo moléculas y te veo a ti,
amigos en las estrellas y caras en las lunas,
veo moléculas y veo la luz
veo colores y formas a medianoche.*²

Desde una perspectiva diferente, también Charles Coulson creía ver el enlace químico, en su caso espoleado sólo por su convicción teórica, a la que añadía el contrapunto de un sano escepticismo científico:^[13]

*A veces me parece que un enlace entre dos átomos es tan real, tan tangible, tan amigable que casi puedo verlo. Y entonces me despierto sobresaltado, porque un enlace químico no es un objeto: no existe, nadie lo ha visto ni podrá verlo. Es sólo un producto de nuestra imaginación.*³

Volviendo a los dominios de la ciencia experimental, una de las técnicas más empleadas para ver moléculas individuales con luz visible consiste en aprovechar las propiedades fluorescentes de un fluoróforo,^[14] un fragmento molecular que absorbe luz y la vuelve a emitir de forma espontánea con otra longitud de onda. Esa cualidad, sin embargo, no la presentan todas las moléculas, y la técnica queda limitada al estudio de la familia que podríamos llamar *luciérnagas moleculares*. Para cubrir un abanico más amplio de moléculas, se ha recurrido a la fluorescencia estimulada.^[15] Esta se basa en la emisión estimulada de luz, fenómeno descrito por Einstein en 1917, cuya aplicación más conocida son los generadores de luz láser. Aun así, la imagen que tenemos de las moléculas con estas técnicas espectroscópicas es semejante a la de las estrellas o los cometas en el firmamento, sin forma bien definida ni textura, y con un color falseado (Figura 4).

Otras técnicas espectroscópicas sofisticadas permiten detectar la posición de una única molécula,^[14] como la espectroscopía monomolecular (*single-molecule spectroscopy*, SMS), sin más información sobre forma o textura. Una vez más, como las estrellas observadas a simple vista. La espectroscopía Raman estimulada de femtosegundo (FSRS), por otra parte, inicia un proceso fotoquímico mediante un láser y a continuación realiza espectros Raman estimulados, para lo

²*I see molecules and I see you, / I see friends in stars and faces in moons, / and I see molecules I see light / I see colors and shapes in the middle of the night.*

³*Sometimes it seems to me that a bond between two atoms has become so real, so tangible, so friendly that I can almost see it. And then I awake with a little shock; for a chemical bond is not a real thing: it does not exist: no one has ever seen it, no one ever can. It is a figment of our own imagination.*

⁴*Material formado por una sola capa de átomos de carbono con la estructura hexagonal del grafito.*

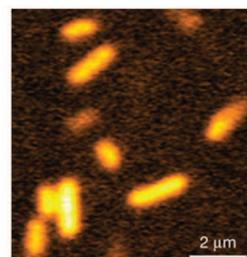


Figura 4. Imagen por microscopía de emisión estimulada de la cromoproteína citoplasmática gtCP en células vivas de *Escherichia coli*.^[15] Reproducido con permiso de Macmillan Publishers Ltd: *Nature*, **461**, 1105, © 2009.

cual utiliza otros dos láseres pulsados, con una resolución temporal del orden de los femtosegundos (10^{-15} s), lo que permite visualizar los desplazamientos atómicos asociados a la reacción fotoquímica estudiada.

Además de las técnicas espectroscópicas y de difracción ya comentadas, hoy disponemos de un surtido de microscopías con las que ver cada vez más de cerca las moléculas y sus átomos: AFM (microscopía de fuerza atómica), STM (microscopía de barrido de efecto túnel), SEM o TEM (microscopía electrónica de barrido o de transmisión), STEM (microscopía electrónica de transmisión y barrido), o EELS (espectroscopía de pérdida de energía electrónica). El primer aldabonazo lo dieron investigadores de IBM cuando consiguieron ordenar sobre una superficie de níquel unos cuantos átomos de Xe con un microscopio STM, formando la siglas de la compañía.^[16] Con el mismo microscopio obtuvieron de esos treinta y cinco átomos una imagen que dió la vuelta al mundo.

Mediante el uso de esas técnicas (TEM con corrección de aberración) se ha podido ahora observar el desplazamiento en sentidos opuestos de dos átomos de titanio en la fase paraeléctrica del ferroeléctrico PZT ($\text{PbZr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8}\text{O}_3$).^[17] Otros investigadores han observado una lámina de grafeno⁴ suspendida al trasluz del haz de electrones de un microscopio TEM, y han descrito con lujo de detalles los paseos de algunos átomos a lo largo de sus bordes irregulares con una pincelada de poesía cuando afirman que "los hexágonos débiles son fugaces".^[18]

En una colaboración entre diversos grupos europeos se han construido sobre una superficie redes bidimensionales con un metal de transición y moléculas orgánicas. Las imágenes STM nos muestran claramente la simetría y la regularidad de la redícula que forman (Figura 5, izquierda).^[19] Desde un punto de vista bien diferente, el de la inspiración artística, el pintor chino Ding Yi ha visto unas redículas sorprendentemente semejantes (Figura 5, derecha).

Si nos referimos a moléculas strictu sensu, un bello ejemplo nos lo proporcionan las imágenes de un ftalocianinato de ter-

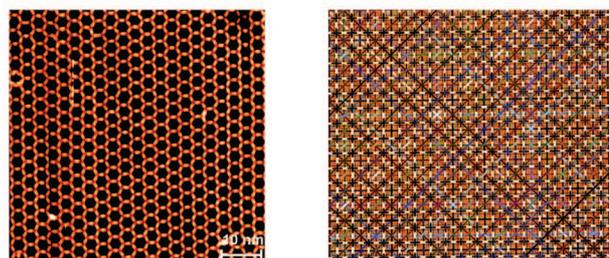


Figura 5. Imagen STM de una red de átomos de cobalto unidos por puentes NC-Ph₃-CN (izquierda), reproducida con autorización de *Nano Lett.* **7**, 3813, © 2007 American Chemical Society, comparada con la obra *Aparición de cruces 97-14*, de Ding Yi (derecha).

bio que, depositado sobre una superficie de cobre, ha sido observado mediante microscopía STM.^[20] Las imágenes de esas moléculas son parecidas a las que dibujamos a partir de los datos de difracción de rayos X (Figura 6), aunque con un aspecto mucho más delicado y sensual que la clásica representación de bolas y varillas, trasunto de los ositos de peluche de Pauling y Hayward. El uso de estas técnicas, no obstante, requiere que las moléculas a observar estén depositadas sobre una superficie, por lo que no vemos la molécula en todo su volumen, sino tan solo la parte expuesta, a modo de bajorrelieve.

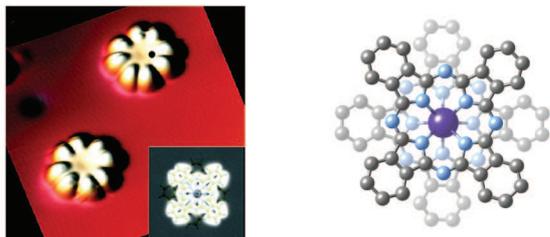


Figura 6. Imágen STM de una molécula de ftalocianinato de terbio depositada sobre una superficie (izquierda, en el recuadro se muestra la imagen simulada), comparada con la producida a partir de la estructura de rayos X, en la que se han ensombrecido los átomos más alejados al veedor. Reproducido con autorización de *Nano Lett.* **8**, 3364, © 2008 American Chemical Society.

Una visión comparable fue glosada por Mose Allison en la canción "*Your Molecular Structure*" (1968), asociando la belleza de una mujer a su estructura molecular. Podríamos invertir ahora la metáfora, y dedicarle el estribillo a estas y a otras muchas moléculas cuyas formas hemos aprendido a ver y a apreciar gracias a todo el arsenal de técnicas físicas y computacionales:

*Tu estructura molecular
es algo especial
ejemplo refinado
de diseño funcional.*⁵

Muy recientemente, un grupo de Tsukuba comandado por Kazu Suenaga ha podido ver átomos individuales mediante la técnica EELS.^[21] El problema hasta ahora, dicen, era que para tener una imagen de un átomo con suficiente brillo y resolución, hay que usar un haz de electrones de energía elevada (unos 100 kV) que desplaza las moléculas, alterando su forma y la posición de los átomos, que salen movidos en la foto. Estos investigadores han conseguido buenas imágenes usando un haz de menor energía (60 kV) al tiempo que compensaban la pérdida de resolución y brillo mediante un nuevo método de corrección de aberraciones. El objeto de su estudio ha sido un sistema de fullerenos endoédricos (es decir, con un átomo de lantano o erbio encerrado en una esfera hueca formada por 82 átomos de carbono), encapsulados a su vez dentro de nanotubos de carbono. La combinación de fullerenos y nanotubos se conoce con el nombre de *peapods* o *vainas de guisante* (Figura 7). Resulta que al colisionar con la muestra los electrones experimentan dispersión inelástica –pierden energía. Como la cantidad de energía perdida es característica del átomo con el que chocan, la señal EELS da información sobre la naturaleza del átomo que está viendo el haz de electrones y es posible obtener un mapa de distribución de cada

elemento químico en la muestra. En el experimento que nos ocupa, es posible discernir de esta manera el átomo pesado de su jaula de átomos de carbono. De este modo Suenaga y su grupo han demostrado que se puede distinguir un guisante de lantano de otro de erbio encapsulados en la misma vaina nanotubular.

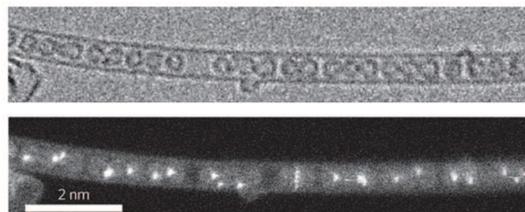


Figura 7. Vaina nanotubular de carbono con guisantes de metalo-fullereno en su interior, vista por microscopía EELS, en imágenes de campo brillante (BF, parte superior) y de campo oscuro anular (ADF, parte inferior). En la imagen inferior, cada punto brillante corresponde a un átomo de erbio encerrado dentro de un guisante formado por 82 átomos de carbono. Reproducido con permiso de Macmillan Publishers Ltd: *Nature Chem.*, **1**, 415, © 2009.

Más recientemente, usando guisantes de disprosio, otro grupo ha podido ver cómo el átomo de disprosio abría la pared del fullereno y éste se fusionaba con un fullereno vecino, a la manera de una mitosis celular al revés. Ello se atribuye a que los electrones lanzados por el microscopio sobre la muestra arrancan un electrón del átomo metálico, pasándolo a su estado de oxidación +4 que es capaz de romper los enlaces carbono-carbono. La repetición de este proceso va fusionando sucesivas esferas de fullereno hasta llegar a formar un nuevo nanotubo encajado dentro del original. Los átomos de disprosio liberados se confabulan entonces para cortar las paredes del nanotubo exterior actuando en comandita, partiéndolo en dos y sellando posteriormente los extremos.^[22]

Otras interesantes vistas de nanotubos se han obtenido mediante una nueva técnica que combina un pulso de electrones y otro de luz visible, generando imágenes con resolución espacial de un nanometro y temporal de un femtosegundo, y que ha sido bautizada *PINEM* (acrónimo de *photon-induced near-field electron microscopy*).^[23]

Posiblemente la visión más cercana y precisa de una molécula, y también la más celebrada, corresponde a la foto de una molécula de pentaceno (cinco anillos de benceno fusionados) depositada sobre una superficie de cobre (Figura 8) obtenida mediante microscopía de fuerza atómica de no-contacto (NC-AFM) por un grupo de IBM en Zurich. Para ello han usado un procedimiento muy astuto, que consiste en hacer una punta de microscopio fina y bien definida mediante la incorporación de una molécula de CO, con lo que mejora la baja resolución debida a la anchura y las irregularidades de la punta de la sonda.^[24]

Otras vistas extraordinarias del pentaceno se habían obtenido antes mediante STM.^[25] Aplicando el voltaje adecuado, la corriente túnel entre la molécula y la punta del microscopio reproduce la topología del HOMO (orbital molecular ocupado de mayor energía), con sus cinco planos nodales. Si se invierte el voltaje, se produce efecto túnel en dirección opuesta, de la punta a la molécula. En este caso la imagen STM nos permite visualizar la distribución del LUMO (orbital molecular desocupado de menor energía) con un plano nodal más.

⁵*Your molecular structure / Is really something fine / A first rate example / of functional design.*

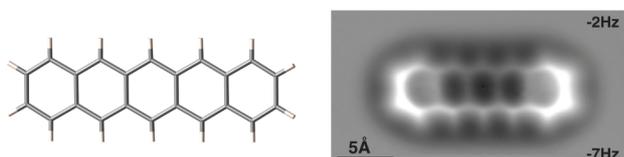


Figura 8. Estructura de la molécula de pentaceno deducida de los experimentos de difracción de rayos X (izquierda), y observada a través de microscopía NC-AFM (derecha). Reproducido de *Science* **325** (2009) 1110 con autorización de AAAS.

Moléculas imaginadas o formas inspiradas en moléculas es lo que nos ofrece la artista Jo Milne en una colección presentada en 2008.^[26] Más que representar moléculas, su objetivo es aprovechar el tipo de representaciones propias de la ciencia para generar formas abstractas con una gran capacidad de sugestión. Forma y textura resultan así más importantes que la propia estructura. Por eso las *moléculas* aparecen truncadas e ignoramos qué porción de las mismas se extiende más allá de los confines del cuadro. Parte de la colección prescinde del formato rectangular del cuadro para pasar a adoptar cada obra también una silueta de aspecto molecular (Figura 9), que introduce incisiones en la molécula representada. Una vez liberada la obra del corsé del formato rectangular, unas sujeciones circulares en el dorso permiten colgar estas piezas con cualquier orientación, ofreciendo percepciones muy diversas. Consigue con ello aportar a la contemplación de la obra un carácter lúdico semejante al que disfrutamos cuando observamos nubes e intentamos descubrir formas reconocibles, comunes o fantásticas.

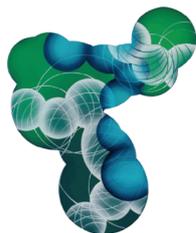


Figura 9. Pieza de la instalación *Essentially compact schemes for unsteady incomprehensible flow*, de Jo Milne, pintura acrílica sobre madera (2008). Reproducida con permiso de la autora.

De las cinco características de un objeto que reconocemos al verlo, tres pueden identificarse para una molécula mediante las diversas técnicas físicas comentadas aquí: posición, tamaño y forma. ¿Tienen textura y color las moléculas? Empecemos por aclarar qué entendemos por textura. Posiblemente esta palabra se refiere a las características de la superficie como granulosidad, porosidad o tersura, que percibimos en objetos habituales por todo un entramado de pequeñas sombras y gradaciones de color. A diferencia de esos objetos, el exterior de una molécula no tiene una superficie bien definida. Sin embargo, una molécula suficientemente grande sí tiene regiones de diferentes densidades electrónicas que pueden constituir una auténtica textura molecular. Seguramente a medida que se continúe mejorando la reso-

lución de las técnicas de observación podremos llegar a ver tales texturas.⁶ La espectroscopía túnel de barrido (STS), que se puede realizar con un microscopio STM que cumpla con ciertos requisitos, puede ofrecer información sobre los niveles de energía asociados a la densidad electrónica en cada punto de una molécula depositada sobre una superficie.^[27] En cierto modo, la diferente distribución de niveles electrónicos en cada punto se podría percibir como una textura molecular.

¿Y el color? El color de una sustancia viene determinado por su espectro de absorción —qué longitudes de onda del espectro visible absorbe y en qué proporción. La absorción de luz es un fenómeno que se produce a escala molecular y, por tanto, no es descartable que se pueda observar el color de cada molécula individualmente. Si pudiese enfocarse un láser en una región suficientemente pequeña de una molécula, sería incluso posible ver regiones de diferentes colores, pues la absorción de luz está asociada generalmente a un grupo reducido de átomos dentro de una molécula llamado *cromóforo*: unos dobles enlaces conjugados en el caso de moléculas orgánicas, o un átomo metálico en el caso de compuestos de coordinación como, por ejemplo, las proteínas azules de cobre. Sin embargo, no hay que olvidar que las técnicas que nos permiten ver posición, forma y tamaño de las moléculas —y posiblemente también su textura— utilizan campos eléctricos o magnéticos (STM y AFM) o radiaciones de alta energía (rayos X), mientras que el color está indisolublemente asociado a la interacción con la luz visible. Por tanto, para poder ver las cinco características de una molécula seguramente deberán desarrollarse nuevas técnicas que combinen más de un tipo de sonda, de forma parecida a como la fotocristalografía^[28] sincroniza pulsos de un láser visible y de rayos X para obtener estructuras promedio de un gran número de moléculas.

El relojero, para ensamblar los engranajes de sus maquinarias, debe verlos en todo el sentido de la palabra, reconstruyendo las formas en sus mínimos detalles. Pero también debe ser capaz, con la ayuda de instrumentos de precisión, de manipular las piezas y colocar cada una en el lugar adecuado. En el mundo molecular se puede confiar en las propiedades químicas de las piezas para conseguir un autoensamblaje, depositando por ejemplo bromoderivados de la tetrafenilporfirina sobre una superficie, y dejándolos a su albedrío para que se deslicen sobre ella hasta encontrarse y formar los enlaces químicos que los fijan en la arquitectura prevista.^[29] Por otro lado, las portentosas técnicas microscópicas STM y AFM van más allá, permitiendo ver y manipular a un tiempo. Un ejemplo de cómo se puede actuar como un auténtico relojero molecular se encuentra en la observación y manipulación mediante un microscopio STM de dos moléculas de iodobenceno paso a paso, hasta formar una molécula de bifenilo.^[30] Rozando el límite de miniaturización —¿existe un límite?—, se puede también con esta técnica cambiar la carga de un único átomo adsorbido sobre una superficie, alterando a voluntad al mismo tiempo sus propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas.^[31]

Seguramente en el siglo XXI seguirá creciendo el número de visualizadores y veedores, al tiempo que serán cada vez menos los visionarios y videntes de moléculas. Y aquello que se ve se puede controlar mucho más fácilmente, por lo que a la química y la física de moléculas individuales le espera sin duda un futuro brillante. Habrá que estar ojo avizor.

⁶Es interesante recoger aquí el comentario de un revisor de este artículo: "Es muy difícil hablar de la textura de una representación bidimensional. En mi opinión, lo que proporciona es una sensación de textura y, por lo tanto, depende mucho del tipo de representación y del observador".

Agradecimientos

El autor agradece a Mario Ruben diversos comentarios y sugerencias, en particular la posibilidad de asociar la información de STS a la textura de una molécula; a Marta D. Rossell algunas puntualizaciones sobre las técnicas SEM, TEM, STEM y EELS; a Félix Zamora por referencias y precisiones sobre las técnicas STM y AFM, y a Miguel A. Cuevas sus comentarios sobre aspectos relacionados con las técnicas de difracción. Asimismo agradece a los dos revisores de este artículo por proponer algunas referencias y reflexiones adicionales que han sido incorporadas a la versión final del mismo.

Bibliografía

- [1] M.-A. Gaudin, *L'architecture du monde des atomes dévoilant la structure des composés chimiques et leur cristallo-génie*, Gauthier-Villars, París, **1873**.
- [2] A. Besant, C. W. Leadbeter, *Occult Chemistry: Clairvoyant Observations on the Chemical Elements*, Theosophical Publishing House, Londres, **1919**; A. Bessant, C. W. Leadbeater, *Química oculta: la explicación de los enigmáticos fenómenos*, Ed. Humanitas, Barberà del Vallés, **2007**; se puede encontrar la tercera edición en Internet: http://www.tphtha.ws/TPH_OCTC.HTM, consultado el 27/1/2010.
- [3] E. Abbe, *Arch. Mikroskop. Anat.* **1873**, *9*, 413–468.
- [4] K. R. Chi, *Nature* **2009**, *462*, 675–678; una cronología de hitos en microscopía y un breve resumen de cada uno de ellos se pueden encontrar en: <http://www.nature.com/milestones/milelight/timeline.html>, consultado el 7/1/2010.
- [5] Para más información sobre la base de datos estructural de Cambridge (CSD), ver: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>, consultado el 28/1/2010.
- [6] Para más información sobre la base de datos de proteínas (PDB), ver: <http://www.rcsb.org/pdb/>, consultado el 28/1/2010.
- [7] Para más información sobre bases de datos de estructuras inorgánicas (ICSD y Pearson's Crystal Data) y de metales (Crystmet), ver: <http://www.fiz-karlsruhe.de/icsd.html>, <http://www.crystalimpact.com/pcd/> y <http://www.tothcanada.com/databases.htm>, consultados el 28/1/2010.
- [8] P. Coppens, *Chem. Commun.* **2003**, 1317–1320.
- [9] L. Pauling, *General Chemistry*, Freeman, San Francisco, **1947**.
- [10] K. D. M. Harris, M. Tremayne, B. M. Kariuki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 1626–1651.
- [11] H. N. Chapman, *Nature Mater.* **2009**, *8*, 299–301.
- [12] K. S. Raines, S. Salha, R. L. Sandberg, H. Jiang, J. A. Rodríguez, B. P. Fahimian, H. C. Kapteyn, J. Du, J. Miao, *Nature* **2010**, *463*, 214–217.
- [13] C. A. Coulson, *J. Chem. Soc.* **1955**, 2069–2084.
- [14] W. E. Moerner, *J. Phys. Chem. B* **2002**, *106*, 910–927.
- [15] W. Min, S. Lu, S. Chong, R. Roy, G. R. Holtom, X. S. Xie, *Nature* **2009**, *461*, 1105–1109.
- [16] D. M. Eigler, E. K. Schweitzer, *Nature* **1990**, *344*, 524–526.
- [17] C.-L. Jia, S.-B. Mi, K. Urban, I. Vrejoiu, M. Alexe, D. Hesse, *Nature Mater.* **2008**, *7*, 57–61.
- [18] Ç. Ö. Girit, J. C. Meyer, R. Erni, M. D. Rossell, C. Kisielowski, L. Yang, C.-H. Park, M. F. Crommie, M. L. Cohen, S. G. Louie, A. Zettl, *Science* **2009**, *323*, 1705–1708.
- [19] U. Schlickum, R. Decker, F. Klappenberger, G. Zoppellaro, S. Klyatskaya, M. Ruben, I. Silanes, A. Arnau, K. Kern, H. Brune, J. V. Barth, *Nano Lett.* **2007**, *7*, 3813–3817.
- [20] L. Vitali, S. Fabris, A. M. Conte, S. Brink, M. Ruben, S. Baroni, K. Kern, *Nano Lett.* **2008**, *8*, 3364–3368.
- [21] K. Suenaga, Y. Sato, Z. Liu, H. Kataura, T. Okazaki, K. Kimoto, H. Sawada, T. Sasaki, K. Omoto, T. Tomita, T. Kaneyama, Y. Kondo, *Nature Chem.* **2009**, *1*, 415–418.
- [22] A. Chuvilin, A. N. Khlobystov, D. Obergfell, M. Haluska, S. Yang, S. Roth, U. Kaiser, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 193–196.
- [23] B. Barwick, D. J. Flannigan, A. H. Zewail, *Nature* **2009**, *462*, 902–906.
- [24] L. Gross, F. Mohn, N. Moll, P. Liljeroth, G. Meyer, *Science* **2009**, *325*, 1110–1114.
- [25] J. Repp, G. Meyer, S. M. Stijckovic, A. Gourdon, C. Joachim, *Phys. Rev. Lett.* **2005**, *94*, 026803.
- [26] Para más información sobre Jo Milne y su obra: <http://www.jomilne.com>, consultado el 7/1/2010.
- [27] M. Ruben, J.-M. Lehn, P. Müller, *Chem. Soc. Rev.* **2006**, *35*, 1056–1067.
- [28] P. Coppens, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 4280–4281.
- [29] L. Grill, M. Dyer, L. Lafferentz, M. Persson, M. V. Peters, S. Hecht, *Nature Nanotech.* **2007**, *2*, 687–691.
- [30] S. W. Hia, L. Bartels, G. Meyer, K.-H. Rieder, *Phys. Rev. Lett.* **2000**, *85*, 2777–2780.
- [31] J. Repp, G. Meyer, F. E. Olsson, M. Persson, *Science* **2004**, *305*, 493–495.

