

Química e Nanotecnologia: uma grande parceria. O desenvolvimento da Ciência e Tecnologia (C&T) vem integrando várias áreas do conhecimento, levando ao mesmo tempo a uma crescente miniaturização dos sistemas e dispositivos funcionais. O foco atual da C&T está principalmente sobre a nanoescala, onde notáveis progressos vêm sendo alcançados graças à evolução do planejamento molecular dos materiais, e da capacidade de lidar com as estruturas ao nível atômico-molecular. De fato, atualmente, os avanços nos materiais já estão sendo ditados pela capacidade de controlar a distribuição espacial dos elementos estruturais. Na convergência com as nanociências, mudanças de paradigma já estão ocorrendo na Física, Química, Biologia, Medicina, e Ciência dos Materiais, extrapolando os limites dimensionais do mundo clássico para entrar no domínio quântico dos átomos e moléculas, tão familiar aos químicos.

A Química realmente está em todo lugar, até no coração e consciência. A mãe Natureza a tem praticado há bilhões de anos, aprendendo como escolher as espécies certas para formar sistemas mais organizados, capazes de se automontarem e até de evoluírem para formas autoreplicantes. Na fotossíntese e cadeia respiratória mitocondrial podemos encontrar exemplos típicos de processos organizados, onde o fluxo de energia/elétrons é ditado pelo gradiente de potencial exibido pelas biomoléculas localizadas estrategicamente ao longo das membranas celulares internas, permitindo realizar com eficiência a conversão de energia que mantém a vida. A natureza também aprendeu a realizar processos normalmente considerados drásticos e difíceis, porém de forma suave e em condições ambientes, como é o caso da fixação do nitrogênio molecular. Ao mesmo tempo conseguiu regular a atividade das enzimas através de mecanismos alostéricos, aumentando ou interrompendo sua ação, como se fossem verdadeiras máquinas nanométricas. Finalmente, a Natureza acabou criando com moléculas uma máquina capaz de aprender, que evoluiu até formar uma fantástica rede de neurônios, capaz de realizar 10^{17} operações por segundo; mil vezes mais rápido que o computador Blue Gene da IBM, considerado o mais possante já feito pelo homem. Trata-se, evidentemente, do computador molecular “molhado” que chamamos de Cérebro!

Assim, por meio de exemplos, a Natureza está mostrando ao Químico como ascender ao próximo degrau na escala evolucionária. Para isso será necessário ampliar a visão para além das moléculas, e aprender suas linguagens como em todo processo de comunicação. As moléculas fazem isso o tempo todo: a fenolftaleína, por exemplo, cora-se em meio básico, para sinalizar a falta de prótons. Essa mudança, tão trivial, não é muito diferente da resposta binária de uma junção p-n clássica utilizada nas portas lógicas (tipo YES e NO) de um computador. De fato, as moléculas sinalizam de alguma forma quando sofrem transformações físicas ou químicas, respondendo como se fossem as clássicas portas lógicas (tipo NOT, AND, OR, NOR etc) utilizadas em processamento binário. Assim, com certeza, as moléculas podem ser usadas em computação. Porém, será que é possível reduzir tal dispositivo lógico a uma única molécula? A resposta é sim, porém tal desafio, sem dúvida, será enorme.

As propriedades das moléculas isoladas não são necessariamente as mesmas das espécies correspondentes, bem conhecidas do Químico. Assim, mesmo a simples passagem de elétron através da molécula representa um problema tão desafiador que novas teorias têm aparecido com frequência, levando em conta, por exemplo, os níveis internos de energia, efeitos de bloqueio coulombiano e até novos modelos capazes de lidar com a interface molécula-eletrodo. Por outro lado, também deve ser dito que não é nada fácil colocar uma molécula no espaço nanométrico de dois eletrodos especialmente projetados para isso. Além de levar tempo, é extenuante e nem sempre reprodutível. E quanto tempo seria necessário para produzir um milhão de desses dispositivos monomoleculares? Nem é preciso responder. Com certeza, outro procedimento será necessário para construir dispositivos moleculares.

A solução encontrada pela Natureza foi simplesmente deixar que as moléculas sejam guiadas pela própria afinidade química para gerar sistemas organizados, encontrando dessa forma suas próprias espécies complementares através do reconhecimento molecular. Dessa forma surgiram estruturas automontadas e autoreplicantes. Em princípio, a Química poderá fazer até mais do que isso, pois não é limitada pelo uso de moléculas que estão presentes na Natureza.

Existe ainda um outro conceito a ser explorado nessa linha. Moléculas distintas podem ser colocadas em sistemas organizados de forma que possam atuar de forma cooperativa ou sinérgica, expandindo sua ação para além do plano individual. Tal efeito, que vai além da molécula, traduz o genuíno conceito de Química Supramolecular estabelecido por Jean-Marie Lehn. Por isso, atualmente a Química Supramolecular é considerada o passaporte para a Nanotecnologia Molecular. Novas estratégias em Nanotecnologia já estão surgindo com base na Química Supramolecular, levando a materiais e medicamentos inteligentes, assim como ao desenvolvimento de sensores avançados e dispositivos eletrônicos e de conversão de energia.

Da mesma maneira, a Química, através do planejamento molecular dos materiais, está convertendo os óxidos metálicos clássicos, bem como polímeros e metais, em interessantes materiais nanoestruturados, nanofios e nanopartículas coloridas, dotadas de novas propriedades. Nanocompósitos híbridos (orgânicos/inorgânicos) já estão invadindo as indústrias automobilísticas e de plástico, melhorando as características mecânicas e o desempenho dos materiais, proporcionando ainda barreiras contra gases, chama e impacto. Nanotubos de carbono ou de semi-condutores como sulfeto de cádmio estão sendo explorados como nanotransistores, nanofios e nanodispositivos emissores de luz. Da mesma forma, novos catalisadores dotados de canais e nanoestruturas, ou sítios de alta atividade, estão sendo desenvolvidos visando uma maior seletividade e eficiência. Novas drogas e princípios ativos, ancorados sobre nanopartículas, ou intercalados em materiais lamelares, ou ainda encapsulados em nanoesferas, dendrímeros ou nanossomas, já começam a ser usadas na medicina e em cosméticos. Novas terapias e recursos de imagem estão sendo desenvolvidas com o uso de nanopartículas magnéticas e pontos quânticos.

A Nanotecnologia vem sendo incorporada no planejamento estratégico de todos os países desenvolvidos, diante do crescente impacto provocado, como uma verdadeira onda de inovação tecnológica, capaz de movimentar trilhões de dólares na economia mundial, já na próxima década. Em 2005 os investimentos públicos em todo o mundo já se aproximam de 4 bilhões de dólares, distribuídos de forma equilibrada entre os EUA, Japão, União Européia e o conjunto dos demais países (com predominância da China e da Coreia do Sul). Novos centros de Nanotecnologia estão se multiplicando em todo o mundo, estimulando e atraindo investimentos, bem como criando empregos e oportunidades. No Brasil, fazendo uma prospecção otimista, o investimento público em nanotecnologia poderá revelar números bastante expressivos, principalmente se forem computadas as iniciativas de criação do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, em Campinas, ao lado de outras de menor porte, como a implantação de 4 redes nacionais em nanotecnologia molecular (RENAMI), semicondutores, nanomateriais e nanobiologia e de pelo menos três Institutos do Milênio com vocação nanotecnológica. E, principalmente, não podem ser esquecidos os investimentos de algumas FAPs, como a FAPESP, que tem apoiado substancialmente a área Nano no Estado de São Paulo, porém de forma discreta. A implantação de um Programa Nacional de Nanotecnologia e Nanociências está sendo discutida pelo Governo, estimulando ao mesmo tempo a movimentação de algumas sociedades científicas em torno desse tema.

Finalmente, deve ser enfatizado que a Química encontra-se em posição estratégica para atuar e fazer deslanchar a Nanotecnologia, formando uma grande parceria. Isso já se faz evidente na crescente inclusão de temas de Nanotecnologia em todas as revistas internacionais de Química, até nas mais conservadoras. Ao mesmo tempo, já se faz necessário pensar na formação de químicos qualificados para atuar no mercado da Nanotecnologia. Como as Nanociências e Nanotecnologia são essencialmente interdisciplinares, um forte entrosamento terá que ser construído entre a Química e as Ciências dos Materiais, a Eletrônica e a Biologia no currículo da graduação, além de aprimorar a participação da Física e da Matemática. Portanto, é hora de refletir seriamente a respeito, lembrando que os estudantes de hoje serão os principais atores da era Nanotecnológica que está se iniciando.

Chemistry and Nanotechnology: a great partnership. Current developments in Science and Technology (S&T) are integrating many different areas of knowledge, leading to an increasing miniaturization of functional devices and systems. The modern focus of S&T is on the nanoscale, where a remarkable progress has been achieved thanks to the evolution on the molecular designing of materials and on the ability to deal with the structures at the atomic-molecular level. In fact, at the present time, the advances in materials are being determined by the capability of controlling the space distribution of the structural elements. By merging into the nanosciences, dramatic changes of paradigm are already taking place in Physics, Chemistry, Biology, Medicine, Electronics and Materials Science, extrapolating the limits of the classical world to enter the quantum domain of the atoms and molecules, so familiar to the Chemists.

Chemistry is indeed everywhere, even in our heart and mind. Mother Nature has played Chemistry for billions of years, and learned how to choose the right species to form more organized systems, capable of self-assembling and evolving into self-replicating systems, and also performing useful work. In photosynthesis and mitochondrial respiratory chain one can find typical examples of organized processes in which the energy/electron flow matches the gradient of potentials of the biomolecules strategically distributed along the internal membranes, ensuring efficient energy conversion which sustain all the living organisms. Nature has also learned how to perform normally drastic processes under mild conditions, as exemplified by the bacterial nitrogen fixation, and to control the activity of enzymes using allosteric mechanisms, forcing them to work or to rest, as real nanomachines. Finally, Nature succeeded in using molecules to create a learning machine, which has evolved into a fantastic network of interactions, capable of performing 10^{17} processes per second; a thousand times faster than the IBM Blue Gene computer, the best machine ever made by man. Such wet computing machine is, of course, the Brain!

So, Nature is giving the Chemist all the clues to climb another evolutionary step. But, it will be necessary some changes of paradigm; start thinking beyond the molecules and learning their languages for communication. Molecules are playing this game all the times; for instance, phenolphthalein turns into red color in basic media, signaling in this way the lack of protons. This trivial color change is not so different from the binary electrical response of a classical p-n junction, used as logic gate (namely YES or NOT) in your computer. In fact, all the molecules signalize in some way when they undergo chemical or physical changes, providing close analogues to the classical logic gates (NOT, AND, OR, NOR etc) employed in binary processing. So, definitely, molecules can be used for computation. But can we use a single molecule as a logic gate device? The answer is yes, but the challenge is indeed enormous!

Single molecule properties does not always coincide with those well known to the Chemist, for the bulk species. As a matter of fact, electron transfer through a single molecule can be such challenging problem that new theories are often appearing, incorporating for instance their internal energy levels, coulomb blockade effects and more effective models capable of dealing with the molecular-electrode interface. On the other hand, it is far from easy to put a single molecule between two electrodes separated by a nanometric distance. Such process can be rather tedious and irreproducible. So, how long would it take to scale up the production, to make one million of such devices?

Certainly, another approach will be necessary to assemble molecular devices. In fact, Nature has learned that the molecules can be guided using their natural chemical affinity to form self-organized systems, and

to find their complementary partners in molecular recognition processes, giving rise to self-assembled and self-replicating structures. In principle, Chemistry can do even more than this, since it is not limited by the use of naturally occurring molecules.

There is also a new concept to be exploited. Different molecules can be assembled into organized entities in which the several components are able to act synergistically, performing beyond their own individual limits. This is the genuine concept of Supramolecular Chemistry, as proposed by Jean-Marie Lehn. Nowadays, it is considered the best route for Molecular Nanotechnology. Indeed, new strategies are evolving based on Supramolecular Chemistry, leading to intelligent drugs and materials, as well as to the development of advanced sensors, energy conversion and electronic devices.

In the same way, Chemistry, through the molecular design of materials, is converting the classical metal-oxides, polymers and metals into new, exciting nanostructured materials, nanowires and colorful nanoparticles, exhibiting very interesting properties. Hybrid organic-inorganic nanocomposites are already invading the automobile and plastic industry, improving the mechanical and barrier performance of the components and materials. Carbon and semiconductor nanotubes are being exploited as nanotransistors, nanowires and nanoLEDs. Similarly, new catalysts bearing nanostructured channels and highly active sites are being developed, aiming a better selectivity and efficiency. New drugs, anchored on nanoparticles, intercalated into nanolayered materials or encapsulated into nanospheres, dendrimers or nanosomes are being used in medicine and cosmetics. New therapies and imaging processes are being associated with magnetic nanoparticles and quantum dots.

Nowadays, Nanotechnology is part of the strategic plans of all leading countries, because of its increasing impact as the last wave of technological innovation, capable of injecting trillion of dollars in the World economy, in the next decade. In fact, the World public investments are already approaching 4 billion dollars, at comparable rates in USA, Japan, EU and the remaining countries (mainly China and South Korea). Nanotechnology centers are flourishing in those countries, stimulating and attracting venture capitals, while creating new jobs and opportunities. In Brazil, the public investment in nanotechnology can exhibit impressive numbers, if one take into account the existence of the National Laboratory of Synchrotron Radiation and four National Networks in molecular nanotechnology and interfaces (RENAMI), semiconductors and nanomaterials, and in nanobiology. In addition, there are three Millennium Institutes devoted to nanosciences and technology; and the parallel support from some state research foundation agencies, such as *FAPESP*, to research proposals dealing with the nanoscale. As it is happening all over the World, a National Program on Nanotechnology is also under discussion by the Brazilian Government, and the attention of the scientific societies are start moving in this direction.

Finally, Chemistry is having a unique opportunity to launch into Molecular Nanotechnology on a very competitive basis. This is already evident by the inclusion of nanotechnological themes in the international chemistry journals, even in the classical ones. On the other hand, special attention should be given to the formation of qualified Chemists for the Nanotechnology market. Nanosciences and Nanotechnology are essentially interdisciplinary, and strong links should be established between Chemistry and Materials Science, Electronics and Biology, in the undergraduate curriculum, while improving the connections with Physics and Mathematics. So, let's start thinking about it: the students will be the main actors in the incoming Nanotechnology age!

Henrique E. Toma (Universidade de São Paulo - Brazil)