

Общие принципы проектирования нанороботов и нанодинамических систем

Виталий ГРИБАЧЕВ
reshebnik@rambler.ru

Несмотря на огромные усилия международного научного сообщества, подкрепленные весьма существенными финансовыми вливаниями, на данный момент не существует ни одной полностью законченной технологии производства нанороботов, пригодной для повсеместного практического применения. Хотя отдельные перспективные разработки встречаются все чаще.

Введение

В классическом понимании Эрика Дрекслера наноробот — это молекулярная машина, способная складывать предметы и устройства из отдельных атомов. Возможность получать устройства, специфицированные с точностью до отдельного атома, открывает огромные перспективы в получении сверхчистых кристаллов для лазерной техники, высокотемпературных сверхпроводников и сверхвысокочастотных резонаторов, а также мобильных датчиков нанометровых размеров [1] и еще очень много других полезных вещей. Благодаря автономности и подвижности нанороботов можно перейти от планарной технологии производства микросхем к освоению объемного монтажа, что вызовет очередной огромный скачок в их производительности.

Уменьшение размеров осциллирующих элементов позволяет технике осваивать более высокочастотные диапазоны (десятки гигагерц). Кроме того, небольшие размеры нанороботов позволят создавать встраиваемую внутрь человеческого тела технику — компьютеры, функционирующие внутри тела и проецирующие изображения прямо на сетчатку и звук — на слуховые нервы, дополнительные блоки памяти, встроенные прямо в мозг, нейроинтерфейсы, позволяющие человеку напрямую, без дополнительных устройств общаться с машинами. В настоящее время существует и активно разрабатывается проект создания васкулоида — искусственной кровеносной системы, не подверженной атеросклерозу, устойчивой к различным инфекционным агентам и ядам [2]. Все это будет невозможно без создания действующих, управляемых машин молекулярных размеров.

При этом, когда мы говорим о нанотехнике, то будем проводить разграничение между нанороботом в широком понимании и нанодинамической системой [3]. Наноробот — ав-

тономное наноразмерное техническое устройство, способное к произвольным, заранее запрограммированным действиям и самопроизвольным перемещениям. До создания такого устройства еще далеко. Все создаваемые на данный момент наноустройства можно отнести к нанодинамическим системам, то есть достаточно простым объектам, не имеющим в основной своей массе самостоятельных приспособлений для передвижения и способным на ограниченный набор простых механических действий. Чаще всего это состояния «открыто»/«закрыто» или «положение А»/«положение Б». Даже такие простые наноустройства уже способны на многое, например, на точную доставку в раковые клетки лекарств или формирование объемных наноразмерных проводников. Однако до полного практического решения поставленных перед разработчиками проблем еще необходимо решить ряд важных задач.

Для успешного решения задачи построения реально работающей и полезной наносистемы, прежде всего, необходимо разработать единые подходы к проектированию и техническому описанию таких систем.

Кинематические схемы наноустройств

В первую очередь следует определиться с вопросом передачи управляющего сигнала на манипулятор наноробота, то есть с его кинематической схемой. Учитывая, что здесь мы имеем дело просто с кучкой атомов, мы не можем воспользоваться аналогией с макроуровнем и создать из них шестеренки, валы и цепные передачи. Нам в любом случае в той или иной мере придется учитывать квантоворазмерные эффекты.

Следует заметить, что при проектировании наносистем мы имеем дело с квантовой механической реальностью, и многие представления и подходы к проектированию, хорошо зарекомендовавшие себя при проектировании макро- и микроустройств, в области нанотехники могут оказаться неэффективными или даже неправильными.

В принципе, кинематические схемы функциональных элементов нанороботов вполне соответствуют давно известным из классической механики передачам (рис. 1).

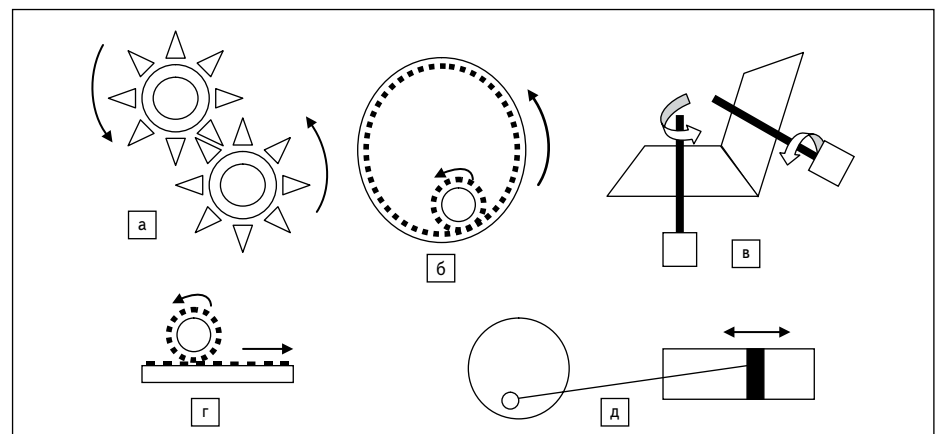


Рис. 1. Виды классических механических передач: а) цилиндрическая зубчатая с внешним зацеплением; б) цилиндрическая зубчатая с внутренним зацеплением; в) коническая; г) реечная зубчатая (кремальера); д) фрикционная

В настоящее время создано достаточно много различных 3D-редакторов, которые позволяют проектировать трехмерные молекулярные структуры (рис. 2) и даже делать некоторые расчеты этих структур, например Nanoexplorer фирмы Nanotitan (платный) [4] и NanoEngineer-1 (бесплатный, распространяемый под лицензией GPL) [5].

Анимацией спроектированных модулей можно полюбоваться, например, на сайте того же Нанорекса [6]. А программа Nanoexplorer позволяет получить доступ к онлайн-базам готовых наномодулей и строить на их основе более сложные конструкции.

Большинство кинематических передач в наномире уже технологически реализованы. Например, Людвиг Бартелс из Калифорнийского университета в Риверсайде провел успешные опыты по самопроизвольному прямолинейному перемещению молекул антрахинона ($C_{14}H_8O_2$) по медной поверхности [8]. Эти опыты реализуют молекулярный аналог реечной зубчатой передачи. В результате опытов установлено, что молекулы антрахинона могут даже нести на себе некоторую полезную нагрузку, перемещая ее вдоль поверхности молекулы диоксида углерода (CO_2). Существуют и другие подобные сообщения. По-видимому, мы здесь сталкиваемся с одним из вариантов каталитического взаимодействия молекул с металлической поверхностью (механизмом скутера).

Аналоги цилиндрических зубчатых передач хорошо реализуются на углеродных нанотрубках (УНТ). Прежде всего, здесь следует отметить технологию производства наноподшипников методом электрического пробоя в воздухе наноструктуры, образующейся с помощью суспензии нанотрубок, нанесенной на хромовые электроды [9]. Электроды из хрома формируются с помощью стандартного метода электронно-лучевой литографии.

Многослойные УНТ оказались очень перспективным объектом для разработки наноподшипников и цилиндрических передач, поскольку за счет квантоворазмерных эффектов внутренние слои нанотрубок могут перемещаться относительно внешних практически без трения. С помощью небольшой модификации технологии на базе многослойных УНТ можно получать выдвижные телескопические конструкции [10]. Сейчас оформилось целое направление, занимающееся разработкой различных устройств с применением многослойных УНТ и электрических контактов (нанозлектромеханические системы, НЭМС) [11]. Эти устройства перспективны для нанозлектроники, поскольку благодаря малым размерам обладают очень хорошими частотными свойствами и пониженным энергопотреблением. Например, расчеты показывают, что осцилляторы на УНТ могут использоваться в частотных диапазонах до десятков гигагерц. Существенный недостаток этой технологии заключается в том, что НЭМС производятся с применением хо-

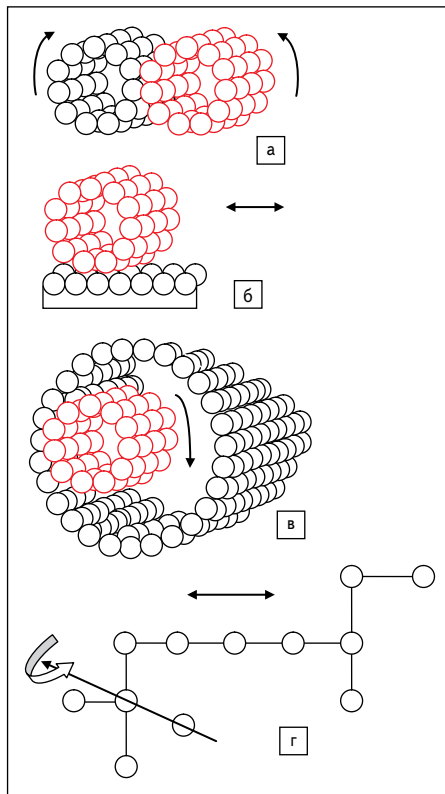


Рис. 2. Молекулярные аналоги наиболее распространенных механических передач: а) молекулярный аналог цилиндрической зубчатой передачи с внешним зацеплением; б) молекулярный аналог реечной зубчатой передачи [7]; в) молекулярный аналог цилиндрической зубчатой передачи с внутренним зацеплением; г) молекулярный аналог фрикционной передачи

рошо отработанных на микросхемах литографических методов, и собрать какой-либо объемный автономный объект (наноробот), изолированный от подложки, по этой технологии затруднительно.

Методики расчетов

Проектирование реально действующих наноустройств по-прежнему остается весьма нетривиальной задачей. Прежде всего, это связано с большими математическими трудностями расчета конфигураций многочастиц систем. В настоящее время существует понимание, что наноробот или нанодинамическая система (НДС) должны представлять собой, по сути, весьма крупную молекулу с числом атомов порядка миллиона (рис. 3). Или совокупность нескольких крупных молекул. Соответственно, возникает большой соблазн воспользоваться классическим уравнением Шредингера, которое позволяет в аналитическом виде определить распределение электронной плотности между атомами, составляющими молекулу, вычислить молекулярные энергетические уровни и в конечном счете определить структуру наноробота как наиболее энергетически выгодную начальную конфигурацию молекулы.

Оператор Гамильтона для такой молекулы, содержащей N -ядер и n -электронов, будет включать в себя члены потенциальной энергии притяжения электронов к ядрам атомов, кинетической энергии электронов, а также компоненты, характеризующие межэлектронное отталкивание, кинетическую энергию ядер и их электростатическое отталкивание:

$$H = -V_{кя} - V_{кэ} + V_{яя} - V_{яэ} + V_{ээ}$$

Выглядеть этот монстр будет так:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m} \nabla_i^2 + \sum_{\beta}^N \sum_{\alpha}^N \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} e^2}{R_{\alpha\beta}} - \sum_{\alpha}^N \sum_i^n \frac{Z_{\alpha} e^2}{R_{i\alpha}} + \sum_i^n \sum_j^n \frac{e^2}{r_{ij}}$$

Здесь буквами R и r обозначены координаты ядер и электронов соответственно; Z и M — заряд и масса ядра, e и m — заряд и масса электронов; индексы i, j относятся к электронам, а индексы α и β — к ядрам атомов. $V_{кя}$ и $V_{кэ}$ — кинетическая энергия ядер и электронов соответственно; $V_{яя}$ — энергия межъядерного отталкивания; $V_{яэ}$ — энергия притяжения электронов к ядрам; $V_{ээ}$ — энергия взаимного отталкивания электронов.

Волновое уравнение Шредингера для этой молекулы будет иметь вид:

$$H\Psi(R_{1\dots N}, r_{1\dots n}) = E\Psi(R_{1\dots N}, r_{1\dots n})$$

Так как речь идет о координатах в трехмерном пространстве, количество независимых переменных в этом уравнении будет равно $3(N+n)$. Если для численного решения этого уравнения будет выбрана разностная схема со 100 узлами по каждой переменной, то расчет будет производиться по количеству переменных не меньше чем 100^{N+n} , а это очень много, даже для современных вычислительных машин. Возможно, такая задача окажется «по зубам» квантовым вычислительным устройствам, но до реального появления квантовых компьютеров еще далеко.

В принципе, можно поступить так, как поступают сейчас при необходимости произвести квантовый расчет молекулы какой-нибудь сложного вещества: ввести некоторые допущения, упрощающие вычисления. Здесь в первую очередь следует упомянуть приближение Борна — Оппенгеймера, которое

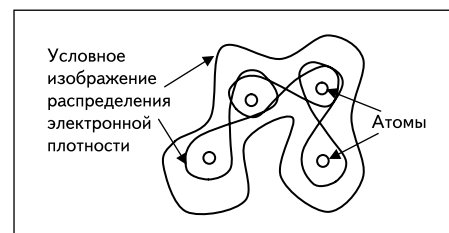


Рис. 3. Представление молекулы с точки зрения квантовой механики

основано на том, что масса ядер значительно больше, чем масса электронов, вследствие чего их можно считать относительно неподвижными. На формальном уровне это будет выражаться в том, что полная волновая функция молекулы может быть представлена в виде произведения ядерной и электронной волновых функций:

$$\Psi(R_{1\dots N}, r_{1\dots n}) = \Psi(R_{1\dots N}) \times \Psi(r_{1\dots n}).$$

Гамильтониан для электронной волновой функции будет иметь вид:

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + V_{яэ} + V_{ээ} + V_{яя},$$

а гамильтониан для ядерной волновой функции:

$$H_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2.$$

С учетом приближения Борна – Оппенгеймера полная энергия молекулы представляет собой сумму энергии электронов, движущихся в поле неподвижных ядер, и энергии колебательно-вращательного движения ядер, то есть:

$$E = E_e + T_n.$$

Таким образом, электронную волновую функцию можно будет отыскать из уравнения:

$$H_e \Psi(r_{1\dots n}) = E_e \Psi(r_{1\dots n}),$$

а ядерную волновую функцию можно найти, воспользовавшись уравнением:

$$(H_n + E_e) \Psi(R_{1\dots N}) = E \Psi(R_{1\dots N}).$$

Для дальнейшего упрощения расчетов по уравнению Шредингера можно использовать дополнительные приближения, в частности, приближение линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) и метод Хартри – Фока. Эти приближения, вне всякого сомнения, существенно уменьшают сложность расчетов, однако вычислительная сложность все еще остается весьма значительной. По-видимому, наилучшим выходом на данном этапе развития вычислительных средств будет спуск на более низкий уровень точности вычислений путем перехода к более грубым моделям молекулярной динамики (МД). Такой переход будет вполне правомерным, если поведение моделируемой системы рассматривается вблизи малых значений безразмерного параметра l , который представляет собой отношение длины термической волны де Бройля (λ) к характеристическому расстоянию (d) между ядрами рассматриваемой молекулы:

$$l = \lambda/d = (\hbar^2(2\pi M k_B T)^{-0.5})/d,$$

где M — атомная масса ядра, T — температура, k_B — постоянная Больцмана. Переход к моделям МД возможен, если параметр $l \ll 1$.

В МД-моделях считается, что частицы подчиняются законам движения классической ньютоновской динамики, а сами атомы обычно представляются в виде системы материальных точек, связанных упругими связями с определенными коэффициентами жесткости, которые могут быть найдены аналитически или определены экспериментально. В силу указанных допущений уравнение движения атома в силовом поле, создаваемом всеми атомами молекулы, имеет вид:

$$m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = F_i(r),$$

где $i = 1, 2, \dots, n$; r_i — радиус-вектор выбранного атома; m_i — его масса; F_i — суммарная сила, действующая на атом со стороны всех остальных атомов молекулы:

$$F_i(r) = -(dE(r)/dr_i),$$

где $E(r)$ — потенциальная энергия атома, зависящая от взаимного расположения всех частиц системы. Эти уравнения движения решают численным методом, задав начальные координаты и скорости всех частиц в системе. Температуру определяют как среднюю кинетическую энергию, приходящуюся на одну степень свободы системы:

$$T(t) = \frac{1}{3Nk_B} \sum_{i=1}^n m_i v_i^{-2},$$

где N — число степеней свободы молекулы; v_i — скорость i -й частицы.

Источники энергии нанороботов

Понятно, что любое техническое устройство, будь оно даже размером с молекулу, для произведения работы нуждается в источниках энергии. Понятно также, что энергия может быть либо в той или иной форме запасена внутри наноробота, либо каким-то образом доставляться извне. Возможны комбинированные способы. Для нанодинамических систем, функционирующих в потоках биологических жидкостей, вопрос обеспечения энергией может решаться за счет универсального биологического носителя энергии, коим является соединение аденозинтрифосфат (АТФ).

Использовать его в качестве топлива можно, применяя фермент АТФ-азу.

АТФ-аза представляет собой широко распространенный фермент, который можно найти в мембранах клеток позвоночных. За счет энергии гидролиза АТФ до АДФ он осуществляет молекулярный транспорт через мембрану ионов Na^+ и K^+ . В ходе предварительных исследований было установлено, что в процессе гидролиза молекулы АТФ одна часть фермента осуществляет враща-

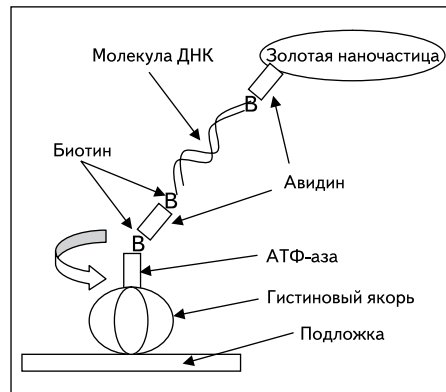


Рис. 4. Молекулярный мотор на основе АТФ-азы

тельное движение относительно другой части, что позволяет строить на основе этих ферментов разнообразные нанодинамические системы.

В работе [12] приводится пример использования АТФ-азы в качестве движущего элемента молекулярного мотора (рис. 4).

На подложку, покрытую Ni-NTA, наносят гистиновый якорь с АТФ-азой, затем добавляют молекулы авидина, биотин, золотые наночастицы, также покрытые авидином, и биотинилированную ДНК. Биотин обладает хорошим сродством к авидину и фактически обеспечивает самосборку устройства в правильном порядке. Если добавить в раствор ионы Mg^{2+} и АТФ, моторчик начинает вращаться. Вращение нанодвигателя хорошо заметно по перемещению золотых наночастиц в поле зрения микроскопа.

Примечательно в этой наноконструкции то, что правильная сборка устройства в значительной степени определяется комбинированными свойствами цепочек ДНК. Это означает, что, используя участки комбинированных цепей ДНК, можно обеспечивать самосборку различных наноконструкций в нужном порядке.

Не все нанороботы будут предназначены для функционирования в биологических средах, поэтому очевидно необходимы и другие альтернативные источники энергии. В качестве одного из вариантов можно предложить использование конструкций на основе квантовых точек (рис. 5).

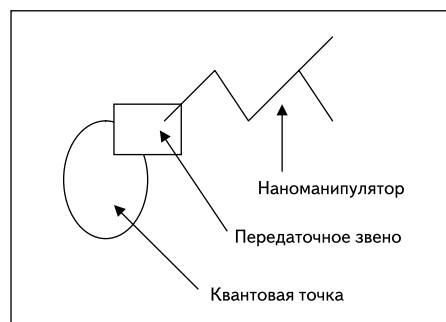


Рис. 5. Принцип действия нанодинамической системы с питанием от квантовой точки

Под воздействием внешнего излучения происходит возбуждение квантовой точки и перевод ее электронов на более высокие уровни. Обычно после этого электроны возвращаются на более низкие энергетические уровни с излучением кванта, однако в этой конструкции возбужденные электроны подхватываются передаточным звеном и могут быть в дальнейшем использованы для перераспределения электронной плотности в наноманипуляторе и как следствие — изменения его молекулярной конфигурации. Прототип подобной системы создан израильскими учеными [13] и подробно обсуждался в одной из предыдущих статей автора [14]. Исследователи использовали этот принцип для управления фотолуминесценцией, однако ничто не мешает использовать тот же принцип для управления изменением конформации молекулы, служащей в качестве наноманипулятора.

В принципе, внешнее когерентное излучение на резонансной частоте можно использовать и для непосредственного срабатывания нанодинамической системы. Манипулятор наноробота можно представить как крупную молекулу, способную находиться в нескольких изомерных состояниях. Количество этих изомерных состояний можно ограничить определенным набором путем введения в молекулу в нужных местах двойных связей, поскольку вращение вокруг двойной связи не происходит. Поворотной-изомерная теория утверждает, что каждое изомерное состояние молекулы характеризуется определенной энергией, а сами состояния отделены друг от друга потенциальными барьерами. Величина этих барьеров существенно больше $k_B T$. Вычислив энергию каждого изомерного состояния, можно определить вероятность нахождения системы в какой-то начальной конфигурации. Эта конфигурация будет представлять собой состояние, энергия которого минимальна. Если внешним импульсом излучения сообщить системе энергию, она будет переходить в другое конформационное состояние, то есть наноманипулятор будет перемещаться, совершая какую-либо работу. В настоящее время работы по управлению энергией многоатомных молекул уже активно ведутся [15].

Вопросы управления наносистемами

Существенные трудности вызывает проектирование систем управления нанороботом. Понятно, что манипулятор наноробота, как и всякая машина, должен управляться программно и алгоритмически. Мы все уже давно привыкли к компьютерным чипам, настолько маленьким, что их можно поместить в миниатюрную бытовую технику, и к микроскопическим печатным платам, несущим эти чипы. Однако предполагаемые размеры нанороботов таковы, что места для разме-

щения даже самого маленького из существующих компьютерных чипов в них попросту нет. Очевидно, что проектирование таких устройств требует особых и, возможно, даже нестандартных подходов.

В некоторых случаях есть возможность обойтись вообще без встроенного компьютера и управлять нанороботом программно. Так, в работе [16] представлен опыт по управлению перемещением металлосодержащих частиц с помощью электромагнитного поля компьютерного томографа. Несомненное преимущество этой технологии заключается в возможности одновременного управляющего и контролирующего воздействия. Есть возможность точно направлять нанообъект к цели и воздействовать на него электромагнитными импульсами через тот же информационный канал. Недостаток метода состоит в необходимости использовать дорогостоящее оборудование (томограф), кроме того, очевидно, что метод подходит только для нанороботов медицинского назначения.

По-видимому, более оправданным является подход, при котором управляющее устройство размещается на борту наноробота, однако вряд ли это будет компьютер в нашем понимании. Для молекулярных устройств больше подходит механическое устройство управляющего блока, наподобие барабана со штырьками у механической шарманки или арифмометра. Механические вычислительные устройства оказались неэффективными в макромасштабе и были заменены современной электроникой, однако на уровне молекул они могут оказаться единственно возможным устройством управления. Из всех наноустройств подобного рода сегодня наиболее перспективным представляется молекулярный процессор на циклических молекулах бензохинона DRQ (2,3,5,6-tetramethyl-1-4-benzoquinone) [17]. 16 циклических молекул DRQ собраны в кольцо или «бублик» и удерживаются вместе водородными связями, посередине «бублика» располагается 17-я молекула DRQ, которая может свободно вращаться. Однако при вращении этой 17-й молекулы изменяется конформация водородных связей, и это вызывает изменение конформации окружающих молекул DRQ, что в свою очередь вызывает деформацию связей с внешней стороны «бублика» и механические перемещения каких-либо дополнительных присоединенных молекулярных цепочек. За один такт такой процессор способен выполнить до 16 инструкций, а всего в различных положениях составных частей этой системы может быть закодировано около 4 миллиардов комбинаций.

Заключение

Таким образом, из всего вышесказанного можно сделать вывод, что в процессе проектирования нанороботов наилучшим подходом будет представление наноробота

не в виде очень маленького технического устройства, а как очень крупной молекулы, что позволит применять для расчетов методы квантовой химии и молекулярной динамики. Кроме того, в процессе проектирования в первую очередь следует решить вопрос кинематического взаимодействия частей наноробота между собой, и здесь наиболее важную роль играет процесс построения математической модели молекулы и компьютерное моделирование взаимных перемещений частей наносистемы друг относительно друга. Не менее важными являются вопросы обеспечения наноробота энергией для движения и вопросы организации внешнего или автономного бортового управления. Что касается сферы применения нанороботов, то здесь следует добавить, что благодаря невероятно малым размерам нанoeлектроника становится легко совместима с различными биосистемами. И, вероятно, мы уже в самом ближайшем будущем увидим начало производства гибридных биоэлектронных систем, использующих наиболее сильные стороны обоих подходов. ■

Литература

1. Грибачев В. П. Наносенсоры // Компоненты и технологии. 2009. № 3.
2. <http://www.rfreitas.com/Nano/Rep031Russian.htm>
3. Грибачев В. П. Нанороботы и нанодинамические системы // Компоненты и технологии. 2008. № 9.
4. <http://popnano.ru/studies/index.php?task=view&id=63>
5. http://www.nanoengineer-1.com/content/index.php?option=com_content&task=view&id=34&Itemid=35
6. http://nanoengineer-1.com/content/index.php?option=com_content&task=view&id=40&Itemid=50
7. <http://www.membrana.ru/lenta/?5263>
8. <http://www.membrana.ru/articles/inventions/2007/01/19/194600.html>
9. http://www.nanometer.ru/2007/06/20/nanotubes_3612.html
10. Dong L. X., et al. IEEE/ASME Trans. Mechatron. 2004. No 9, 350.
11. http://www.nanometer.ru/2008/01/08/11998251039854_5623.html
12. http://www.nanometer.ru/2008/04/30/dnk_51785.html
13. http://www.nanometer.ru/2008/12/23/geksogen_55068.html
14. Грибачев В. Методы получения и применения квантовых точек // Компоненты и технологии. 2009. № 9.
15. Иванова Е. А., Кривцов А. М. Управление энергией многоатомной молекулы / В сб. «Управление в физико-технических системах». СПб.: Наука, 2004.
16. http://subscribe.ru/archive/science.health_ageing.antiageing/thread/650517
17. <http://www.pnas.org/content/105/10/3668.abstract>