

NANO-NAUKA I SOFTVER ZA MOLEKULSKO MODELIRANJE

**Akademik prof.dr Mirsad Nuković,
dr Jusuf Nuković,
Farmaceutsko zdravstveni fakultet Travnik, naukom@yahoo.com**

Mirjana Marinković, Klinički centar u Nišu

Sažetak: Nano-nauka obuhvata niz tehnika i tehnologija u okviru fizike čvrstog stanja i fizike materijala, bioinženjeringa, hemije i informatike koji konvergiraju “odozgo” ili “odozdo” ka nanoskali. Danas se pod nanonaukom i nanotehnologijom podrazumijevaju istraživanja u slijedeće četiri oblasti: nano-elektronika, nano-materijali, molekulske nano-tehnologije i nanodimenziona mikroskopija. Osnovni moto nanotehnologija je: zaposliti individualne atome ili molekule da konstruišu funkcionalne strukture. Smatra se da će nanotehnologija imati mnogo veći impakt na društvo nego što to danas imaju poluprovodničke i bio-tehnologije. Skanirajuća tunelska mikroskopija STM, tehnika zasnovana na atomskim silama, kao i takozvana ATM, spektroskopija, su nezaobilazne tehnike za karakterizaciju materijala u nano-skali. Rezultati modernih programa za molekulsko modeliranje mogu veoma uspješno da simuliraju rezultate nekih instrumenata koji se koriste u instrumentalnoj hemijskoj analizi i praćenju toka hemijskih reakcija. Računarske metode su mnogo jeftinije od spektroskopskih, i u današnje vrijeme su jako pouzdane ako znamo da ih pravilno primenjujemo, ali to naravno ne znači da treba u potpunosti da zamijene eksperimentalne hemijske metode.

Ključne reči: nano-nauka, spektroskopija, softver, molekulsko modeliranje.

NANO SCIENCE AND MOLECULAR MODELLING SOFTWARE

Abstract: Nano Science comprises a line of techniques and a technology within the frame of physical solid condition and physical material, Bio-Engineering, Chemistry and IT that converge from “top down” or “down to top” towards a Nano scale. Today, Nano Science and Nano Technology include researches in the following four areas: Nano Electronics, Nano Materials, Molecular Nano Technologies and Nano Dimensional Microscopy. The primary motto of Nano Technology is: hire individual atoms or molecules to construct functional structures. It is considered that Nano Technology shall have much higher impact onto a society that semiconductor and bio-technologies have today. A Scanning Tunnel Microscopy- STM, a technique based on atomic forces, and so-called ATM spectroscopy, are inevitable techniques for characterization of materials in a Nano scale. The results of modern programmes for molecular modelling can simulate very successfully the results of some instruments used in instrumental chemistry analyse and follow a flow of chemical reactions. Computer methods are quite cheaper than spectroscopic, but today, they are very reliable, if we know how to apply them correctly, but this does not mean, of course, to replace them completely with experimental chemical methods.

Keywords: Nano Science, spectroscopy, software, molecular modelling.

UVOD

Izraz "nano" potiče od grčke riječi „nannos“ koji označava nešto sićušno, a za nanotehnologiju možemo reći da podrazumijeva istraživanje i manipulisanje materijom u sferi ispod 100 nanometara (nm) što predstavlja da se radi o redu veličine molekula i virusa. Deset spojenih atoma vodika imaju dužinu jednog nanometra. Male stvari se ponašaju sasvim drukčije. Time se može objasniti razvoj mnogih novih proizvoda. Istraživači kreiraju majušne stvari sa zapanjujućim svojstvima. Na primer "Carbon nanotubes" nano cijevi od ugljenika, je uzor nanotehnologije. Ugljenik koji se u formi grafita koristi u olovkama je mek i lomljiv, dok je nano cijev od ugljenika koja se sastoji iz veoma tankog grafitnog sloja u formi cijevi prečnika manjeg od pola nanometra čvršća od čelika sto puta, a pri tom je šest puta lakša. Nano cijev je najtvrdi i materijal najstabilnije forme koju poznajemo, pritom i jedan od najboljih provodnika toplote i struje na svijetu. Nano cijev može da transportuje sto puta više struje od bakarne žice. Svi žele nano cijevi.¹¹²

Nano tehnologija može da se koristi i u borbi protiv bakterija ili virusa.¹¹³ Firma Nucryst Pharmaceuticals u kanadskoj provinciji Alberta proizvela je medicinski uređaj koji povezuje narodnu medicinu iz prošlih vremena i stvoreno novo znanje. Još su stari Grci upotrebljavali srebrni prah u liječenju rana tako što su na opekotine stavljali srebrni puder usitnjen do veličine "nana", što je imalo bolje dejstvo nego kada se koriste krupniji granulati. Farmaceutska firma Nucryst je otkrila staru metodu liječenja i dalje je usavršila. Djelici nano dospevaju u kožu i djeluju kontinuirano što omogućuje da se zavoji kod opekotina mijenjaju samo jednom nedjeljno, ranije se to moralo raditi više puta dnevno i za pacijente je bilo jako mučno i bolno.¹¹⁴

¹¹² Benoit Simart, vodeći naučnik na Nacionalnom istraživačkom Konsilu Kanade u Otavi, skraćeno NRC

¹¹³ www.dwelle.de

¹¹⁴ Profesor doktor Gari Sibald sa Univerziteta u Torontu, koji je i načelnik jedne klinike za kožne bolesti

1. NOVI MATERIJALI

Postoji niz definicija pojma nano-nauka, odnosno nano-tehnologija. One se neprestano dopunjuju i usavršavaju. Mi smo ovdje izabrali definiciju američke agencije NASA:¹¹⁵

Nanotechnology is a rapidly expanding field, focused on the creation of functional materials, devices, and systems through the control of matter on the nanometre scale, and the exploitation of novel phenomena and properties at that length scale:

„Nanotehnologija je polje sa brzim rastom, usmjerena na stvaranje funkcionalnih materijala, uređaja i sistema kroz kontrolu materije na nanometarskoj skali, i eksploataciju novih pojava i osobina na toj skali dužine“.

O impaktu nanotehnologija na društvo vrijedno je istaći mišljenje Richard Smalley, dobitnika Nobelove nagrade za hemiju za otkriće treće alotropske modifikacije ugljenika: fullerena C60.: 'The impact of NT on health, wealth, and the standard of living for people will be at least the equivalent of the combined influences of micro-electronics, medical imaging, computer-aided engineering, and man-made polymers in this century'.

("Utjecaj NT na zdravlje, bogatstvo, a životni standard za ljude će biti najmanje ekvivalent kombiniranog utjecaja mikro-elektronike, medicinske slike, inženjeringa uz pomoć računara i vještačkih polimera u ovom stoljeću").

1.1. STM i ATM spektroskopija

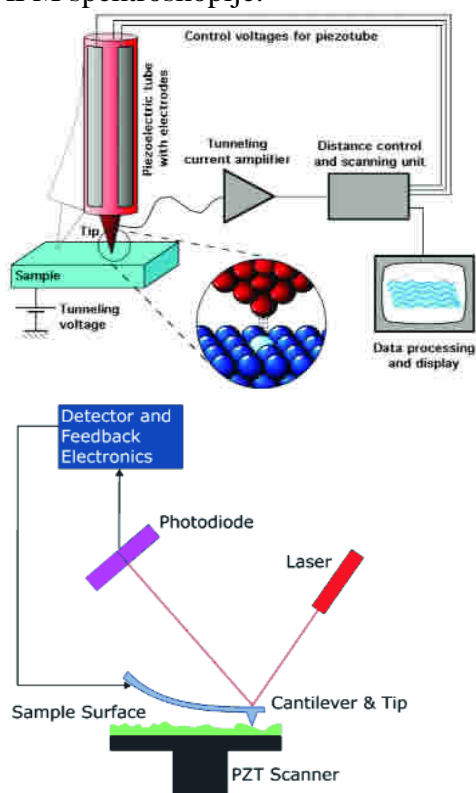
NT je po prvi put uvedena kao pojam 1971. od strane Norio Taniguchi-ja za ultra preciznu manipulaciju (proizvodnju). Glavni napredak

kaže: Korišćenje ovih metoda donelo je veliko poboljšanje u lečenju i previjanju 70 posto pacijenata sa teško zalečivim hroničnim ranama. Mast za lečenje ekcema proizvedena po metodama nanotehnologije već se klinički ispituje u Kanadi.

¹¹⁵ Zoran V. Popović, Institut za fiziku - Beograd, Centar za fiziku čvrstog stanja i nove materijale

učinjen je 1981. pronalaskom skanirajuće tunelske mikroskopije (STM) za koju su G. Binnig i H. Rohrer doбили Nobelovu nagradu za fiziku za 1986. Šematski prikaz STM spektroskopije dat je na slici 1. Ova tehnika zasnovana na atomskim silama, takozvana ATM (atomic force microscopy), spektroskopija (slika 2), otkrivena je 1985. Ove dve tehnike (STM i AFM) su nezaobilazne tehnike za karakterizaciju materijala u nano-skali.

Slika 1. Šematski prikaz STM spektroskopije. Slika 2. Šematski prikaz AFM spektroskopije.



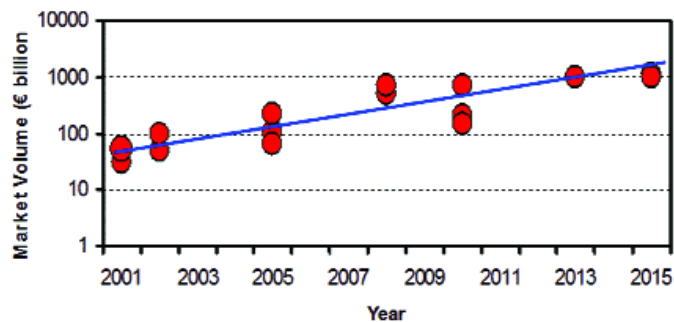
STM omogućava vizuelizaciju oblasti sa visokom gustinom elektronskih stanja i na taj način uočava poziciju individualnog atoma. Koristi se za dobijanje slike površina provodnih uzoraka. Rezolucija ove tehnike je 0.2 nm. Veoma oštar vrh (tip) STM-a se kreće po površini uzorka. Uzorak i tip se nalaze pod naponom i u zavisnosti od njegove veličine elektroni će se kretati (tunelovati) između površine uzorka i tip-a, što ima za posledicu pojavu slabe električne struje. Veličina ove struje zavisi od rastojanja između tip-a i

površine uzorka i njena promjena se vizuelizuje kao izgled površine uzorka. Ova tehnika se ne može koristiti kod izolatorskih uzoraka što je njen glavni nedostatak.

Mikroskopija na bazi atomskih sila ATM, sastoji se od konzole na kojoj se nalazi oštar vrh (tip). Ovaj vrh se dovede do površine uzorka onoliko blizu dok Van der Valsove sile ne prouzvedu izgib konzole. S druge strane, laserski snop je usmjeren na vrh tipa, a reflektovani snop na mrežu (polje) fotodiode. Kada dođe do izgiba konzole, laserski snop reflektovan od tip-a se pomera i pobuđuje različite fotodiode na detektoru. Na ovaj način se dolazi do vizuelizacije oblika površine uzorka. AFM spektroskopija ne zahtijeva posebne uslove (vakuum ili posebnu pripremu uzoraka) pa se može koristiti i za biološke sisteme. Glavni nedostatak ove tehnike je relativno malo polje merenja površine uzorka (150x150 mikrometara), dok u slučaju STM ono je reda nekoliko milimetara.

Danas se pod nanonaukom i nanotehnologijom podrazumijevaju istraživanja u slijedeće četiri oblasti: nano-elektronika, nano-materijali, molekulske nano-tehnologije i nanodimenziona mikroskopija. Predviđa se da će NT biti ključne tehnologije u slijedećim oblastima: Medicina i zdravlje, Informacione tehnologije, Proizvodnja i skladištenje energije, Novi materijali, Hrana, voda i zaštita okoline, Nove instrumentalne tehnike i Bezbjednost.

Slika 3. Ilustracija trenda rasta tržišta proizvoda baziranih na nanotehnologijama.¹¹⁶



Jedno od centralnih pitanja koje se danas postavlja je kako smanjiti rizik od korišćenja

¹¹⁶ Planeta.rs

proizvoda nanotehnologija na najmanju moguću mjeru. U tom cilju zahtijeva se da se, još u istraživačkoj fazi razvoja NT tehnologija, razmatraju pitanja štetnosti uticaja nanotehnologija na zdravlje, bezbjednost i zaštitu okoline. Finansiraju se i posebni projekti vezani za toksikološke studije utjecaja nanočestica na zdravlje.

2. PROGRAMIRANJE I NANOTEHNOLOGIJA

Aktuelna istraživanja u oblasti nanotehnologija uglavnom su povezana sa računarskim simulacijama. Većina nanotehnoloških projekata još uvek nema uslova da se isproba u praksi ali zato mogu da se razvijaju i usavršavaju u virtuelnom svijetu. Pravljenje simulacija je veoma važan korak u kreiranju nano uređaja. Kako su ovi uređaji atomskih razmjera, na njih se ne primjenjuju klasične simulacione metode već se njihov rad može mnogo preciznije opisati sa kvantno-mehaničkim jednačinama. Zahvaljujući preciznom izračunavanju međuatomskih sila u mogućnosti smo da simulacijom tačno definišemo ponašanje nekog nanosklopa. Programiranje simulacija međuatomskih djelovanja je najjednostavniji i najjeftiniji način da se isproba mogući projekat. U okviru ovih simulacija najvažniju ulogu imaju molekularni proračuni. Na nano nivou gravitacija i inercija su zanemarljivi u odnosu na međuatomske i međumolekularne sile. Zbog toga su neophodni novi inženjerski alati koji mogu da proračunaju pravi položaj atoma u okviru molekula, njegove veze sa ostalim atomima u molekulu, kao i stabilnost celog molekula. Ti alati bi, dalje, trebalo da imaju mogućnost simulacije molekulskih reakcija kao i mogućnost proračuna dejstva spoljnih sila na zadati molekul ili grupu molekula. Sve ovo nije nemoguć zadatak i već postoje programi koji se uspješno snalaze u rješavanju ovakvih problema, ali oni rade sa relativno malim brojem atoma.

Nedostatak postojećih programa za molekularne proračune jeste njihovo ograničenje na par stotina hiljada atoma. Kod istraživanja, proračuni sa ovolikim brojem

atoma su sasvim zadovoljavajući, ali za inženjerske zahvate projektovanja nekog nano uređaja neophodan je rad sa milionima atoma. Ako bismo željeli da stvorimo neki makro objekat ređajući atom po atom, tada bi količina atoma sa kojom treba da se operiše u nekom programu bila ekstremno velika. Trenutno ne postoji računarsko rješenje za izvršavanje ovako složenih operacija nad tolikim brojem atoma. Primjera radi, u tijelu čovjeka koji ima oko 70 kg trebalo bi, po proračunima, da bude oko 7×10^{27} atoma.¹¹⁷

2.1. Računarski bazeni

Problem kvantnih proračuna nad velikom količinom atoma za sada se rješava korišćenjem računarskih bazena. Računarski bazen je skup velikog broja snažnih računara koji se nalaze u nekoj mreži. U svakom institutu ili većoj firmi postoji veliki broj računara koji se koriste za jednostavne poslove tipa kucanja pisama ili rad u nezahtevnim programima.

U takvim situacijama procenat iskorišćenosti računara je izuzetno mali tako da su oni uglavnom neiskorišćeni. Dakle, kancelarijski računari se obično isključuju poslje završetka radnog vremena. Ovi računari mogu da se iskorista za komplikovana molekularna izračunavanja koja su potrebna u nanotehnologiji. Svi računari u institutu ili firmi povežu se preko mreže (obično su i povezani) i na svima se instalira softver koji preuzima deo molekularnih izračunavanja kada procesor tog računara nije angažovan. Na ovaj način se kreira bazen procesora koji preuzimaju dio posla u trenutku kada nisu angažovani na svojim primarnim poslovima. Kada se neki računar trenutno ne koristi za tekuće zadatke onda ga program, koji nadgleda bazen, angažuje za izvršavanje unaprijed zadatog proračuna. Tako se angažuje veliki računarski potencijal pa se mogu izvršiti veći molekularni proračuni. Da bi mogao posao da se podjeli na veliki broj računara

¹¹⁷ Mateja Opačić, Programiranje i nanotehnologije, SciTech br.009.

potrebno je da postoji veliki broj ne zavisnih proračuna koji mogu da se prosljede pojedinačnim procesorskim jedinicama na obradu. Ovakvi sistemi zahtjevaju programe specijalno pisane za ovakav distributivan način rada. Od ne specijalizovanih programskih jezika u kojima mogu da se programiraju ovakvi sistemi najpopularniji je Java. Ovakvi bazeni već postoje u mnogim istraživačkim centrima, a NASA svoj bazen koristi, između ostalog, i za molekularne proračune za potrebe nano-tehnologije.

2.2. Softverski alati

U budućem nanotehnološkom svijetu sve će biti softver. Naučnici se trude da naprave nanoasemblere koji su u stanju da kreiraju bilo šta, odnosno sve što vam padne na pamet, atom po atom. Ako je robot u stanju da slaže atome po zadatom programu, onda samo treba da imamo odgovarajuće programe za sve što želimo. Dakle, situacija nije uopšte tako drastično različita od današnje i nemoguća kao što zvuči na prvi pogled. Trenutno za sve što želimo da napra-vimo, bilo da je to pita ili avion, potreban nam je recept ili nacrt, koji je neko nekada smislio i zapisao. Napretkom tehnike olovke i papiri zamjenjeni su računarima, ali i dalje su ljudi ti koji će smišljati recepte, da bi to što pravimo ispalo dobro.

3. SOFTVER ZA MOLEKULSKO MODELIRANJE

Molekulska modeliranja primjenjujemo u svim onim slučajevima kada je nemoguće primjeniti eksperimentalne metode. Nije poznata eksperimentalna metoda kojom može da se izmjeri dužina veze, gustina elektrona, ili raspodjela molekuskog naelektrisanja kod prelaznih stanja i nestabilnih intermedijera. Sa druge strane programi za molekulska modeliranja su moćni u rješavanju ovakvih problema, jer tretiraju nestabilne molekulske vrste na isti način kao i molekule stabilnih jedinjenja. Da bi se računarski rezultati prihvatili kao tačni i pouzdani, potrebno je da

postoji dobro slaganje između eksperimentalnih i računarskih rezultata u onim slučajevima gde su eksperimentalni rezultati dostupni.

NMR spektroskopija je jedna od najmoćnijih metoda za određivanje strukture molekula. Do nuklearne magnetne rezonance dolazi kada se atomska jezgra nekih elemenata izlože dejstvu jakog, homogenog, spoljašnjeg magnetnog polja i istovremeno ozrače elektromagnetnim talasima iz radiofrekventnog dijela spektra. NMR predstavlja izmjenu energije između jezgara i radiofrekventnog zračenja, prilikom koje jedan broj jezgara absorbuje, a preostali broj emituje zračenje iste frekvencije. Mnoga jezgra pokazuju NMR spektre, ali se ^1H i ^{13}C spektri najviše koriste.

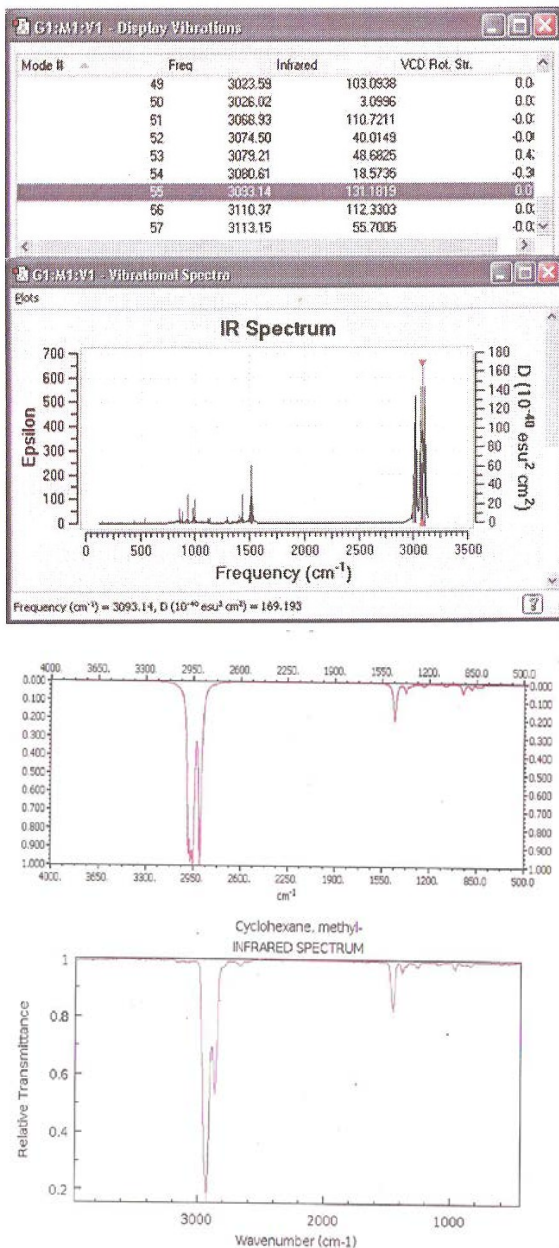
3.1. Infracrveni spektri IR

Kada se kroz prostor ispunjen nekom supstancom, u bilo kom agregatnom stanju, propusti snop infracrvenog zračenja, koji se zatim optičkom prizmom ili rešetkom razloži na monohromatske komponente, primjećuje se, pomoću odgovarajućeg detektora, da na pojedinim frekvencijama dolazi do većeg ili manjeg slabljenja jačine svjetlosti. Razlog ove pojave je selektivna apsorpcija IR zračenja od strane molekula koji sa tim zračenjem dolaze u dodir.¹¹⁸ Molekul apsorbuje energiju kada frekvencija njegovog određenog kretanja odgovara frekvenciji elektromagnetnog zračenja. Kada se promjena intenziteta propuštenog IR zračenja predstavi u zavisnosti od frekvencije i/ili talasne dužine dobija se IR spektar.

Simulacija IR spektra nekog molekula se postiže izračunavanjem njegovih vibracionih frekvencija. Ova problematika će se ilustrovati izračunatim IR spektrom metilcikloheksana.

¹¹⁸ S.M.Milosavljević, strukturne instrumentalne metode, Hemijski fakultet, Beograd, 1994.

Sl.4. Vibracione frekvencije i odgovarajući IR spektar metilcikloheksana



Slika.5. Izračunati (gore) i eksperimentalno dobijeni (dole) IR spektar metilcikloheksana. Poznato je da izračunate vrijednosti vibracionih frekvencija sadrže sistematsku grešku koja velikim delom potiče od zanemarivanja efekata neharmoničnosti površine potencijalne energije u blizini stacionarnih tačaka. Danas postoje različiti softverski paketi koji nam omogućuju da rezultate vibracione analize prikazemo u uobičajenom obliku IR spektra. Prikaz izračunatog IR spektra vidi se na slici, kteiran pomoću programa Gabedit, koji može kao ulazne podatke da koristi izlazne podatke

iz Gausijana. Pri kreiranju IR spektra Gabedit koristi faktor skaliranja, koji za primenjeni nivo teorije iznosi $0,961 \pm 0,079$.¹¹⁹

ZAKLJUČNA RAZMATRANJA

Godišnje, u nanonauke i nanotehnologije Evropa ulaže nekoliko milijardi dolara (koliko i Amerika), a ta ulaganja su sve veća. Razlozi su brojni. Pre svega, strukture ovih dimenzija su naučno interesantne jer se opisuju isključivo kvantnom mehanikom, i na njima se mogu dobro uočiti i iskoristiti suptilni kvantni efekti. Ovome pogoduje i nagli razvoj tehnologije kojom se naučne hipoteze mogu verifikovati. Pomenimo samo mikroskopiju visoke rezolucije, bez koje bi ova istraživanja bila nemoguća. Sa stanovišta ulaganja, najveći motiv je svakako tehnološki razvoj, vezan za specifične osobine nanomaterijala. Najpoznatiji pravac razvoja je nanoelektronika. Celokupna poluprovodnička industrija je danas zasnovana na silicijumu. No tehnologija se već približila fizičkom maksimumu iskorišćenja silikonske elektronike. A i dalje su nam potrebni još brži računari, bolji tranzistori... Došli smo do granice sada mogućeg, i potrebna su sasvim nova rešenja. U tom kontekstu su se nametnule nanotube, ponajviše zbog svojih raznovrsnih osobina.

Dok jedne karakteriše bolja provodljivost, druge mogu biti dobri izolatori. A i za sve "između" moguće je naći odgovarajuću tubu. Imaju podesiva svojstva (mogu biti odlični provodnici, na ivici provodljivosti, ili izolatori) i uvijek možemo izabrati nanotubu koja nam treba jer ih ima beskrajno mnogo. IBM očekuje da će uskoro veliki procenat komponenti biti od ugljeničnih nanotuba. Nanotuba je šest puta lakša od gvožđa a deset puta čvršća. Kada bismo probali da od gvožđa napravimo kabl od Meseca do Zemlje, on bi se od svoje težine pokidao. Od nanotube bismo mogli da napravimo takav kabl, teoretski je to

¹¹⁹ The Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database of the National Institute of Standards and Technology; <http://srdata.nist.gov/cccbdb/vibscale.asp>

zamislivo zato što je nanotuba mnogo jača, a mnogo lakša. Nanotube se najčešće javljaju jedna u drugoj, koaksijalno, i tada se zovu dvoslojne (double-wall), ili višeslojne (multi-wall). Pokazuje se da njihova simetrija uslovljava veoma malu interakciju među slojevima. Stoga je veoma slabo kako rotaciono, tako i trenje pri izvlačenju jedne iz druge. Šta više, pri pogodnom izboru unutrašnje i spoljašnje tube, izvlačenje može biti super glatko, tj. bez ikakvog trenja («teleskopski efekat»). Zbog ovih osobina nanotube se mogu koristiti za nano-mašine, kao njihovi pokretni delovi.

Sigurno će trebati vrijeme za prilagođavanje na nove tehnologije, ali to iz našeg ugla možda izgleda dramatično, a iz ugla novih, mladih generacija, koji već uspješno “barataju” svojim pametnim telefonima i odlično se snalaze u virtuelnom svijetu, to izgleda neće biti nikakav problem.

LITERATURA

1. S.M.Milosavljević, strukturne instrumentalne metode, Hemijski fakultet, Beograd, 1994.
2. Svetlana Marković, Z.Marković, Molekulsko modeliranje, Kragujevac, 2012.
3. Mateja Opačić, Programiranje i nanotehnologije, sciTech br.009.
4. The Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database of the National Institute of Standards and Technology; <http://srdata.nist.gov/cccbdb/vibscale.asp>
5. <http://dwelle.de>
6. <http://planeta.rs>
7. <http://www.nano-technology.com>
8. <http://www.nanocomputer.org>
9. <http://science.nasa.gov/Groups/Nanotechnology/>