



WYDZIAŁ CHEMICZNY
Katedra Chemii Nieorganicznej

Nanotechnologia

Wstępny projekt nanołożyska
w rozdzielczości atomowej

Andrzej Okuniewski
Agnieszka Mielcarek
Aleksander Herman

Gdańsk 2017

Wprowadzenie

Idea budowy niewyobrażalnie małych struktur w skali atomowej nie jest nowa. Już w 1959 roku, R. Feynman, laureat nagrody Nobla z fizyki w 1965 roku, w swoim sławnym wykładzie, zatytułowanym „There’s plenty of room at the bottom!” rozważał możliwość zapisania wszystkich 24 tomów Encyclopedia Britannica na główce szpilki. Spekulował także na temat możliwości zapisu informacji na poziomie atomowym oraz budowy mechanizmów, których części miałyby rozmiary dużych molekuł:

I am not afraid to consider the final question as to whether, ultimately in the great future we can arrange atoms the way we want; the very atoms, all the way down! ... The principles of physics, as far as I can see, do not speak against the possibility of maneuvering things atom by atom. It is not an attempt to violate any laws ... but in practice, it has not been done because we are too big ... The problems of chemistry and biology can be greatly helped if our ability to see what we are doing, and to do things on an atomic level, is ultimately developed – a development which I think cannot be avoided.¹

Obecnie, ponad pół wieku później, nowe rodzaje mikroskopów typu SPM pozwalają nie tylko na wizualizację atomów, ale również na manipulowanie nimi. Te nowe możliwości pomiaru, manipulowania oraz śledzenia samoorganizacji materii w skali atomowej, pozwalają na szybki rozwój dzisiejszej nanotechnologii, oraz spodziewać się w niedługim czasie kolejnej rewolucji prowadzącej do tak zwanej zaawansowanej nanotechnologii.

Nawet w dzisiejszej nanotechnologii, jedna tendencja jest wyraźnie widoczna: w miarę jak maleją rozmiary urządzeń, a zatem i koszty materiałów oraz energii, projektowanie staje się najważniejszą i najdroższą częścią w procesie powstawania nowych rozwiązań!

Koncepcja hiperpowierzchni energii potencjalnej jest podstawą niemal wszystkich praktycznych metod modelowania struktury oraz dynamiki cząsteczek. Hiperpowierzchnia energii potencjalnej opisuje zależność pomiędzy energią potencjalną cząsteczki a jej geometrią. W ramach przybliżeń mechaniki klasycznej, wszystkie ruchy molekuł są wynikiem działania sił wynikających z gradientów na hiperpowierzchni energii potencjalnej, a równowagowe struktury cząsteczek odpowiadają minimom na tej powierzchni.

Najprostszymi modelami hiperpowierzchni energii potencjalnej są popularne w chemii organicznej „pola siłowe” parametryzowane w oparciu o krystalografię rentgenowską, spektroskopię mikrofal, dyfrakcję elektronów, kalorymetrię oraz spektroskopię w podczerwieni.

Oprogramowanie HyperChem™

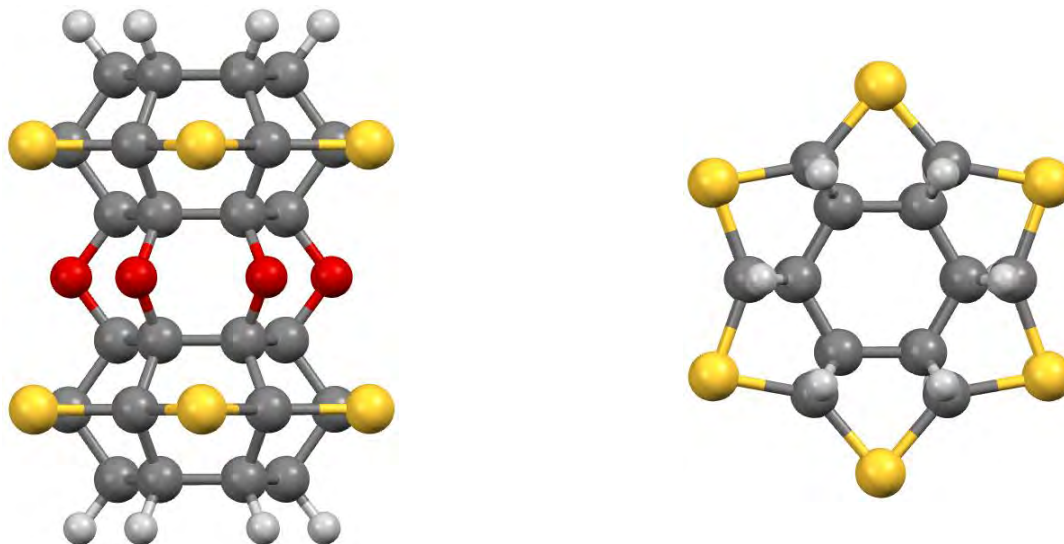
Projekt wykonywać będziemy korzystając z pakietu HyperChem™ 8.08 firmy Hypercube, Inc. Oprogramowanie zainstalowane jest na komputerach w pracowni. W celu wykończenia projektu na własnym komputerze można pobrać 10-dniową wersję próbną programu ze strony producenta:

www.hyper.com

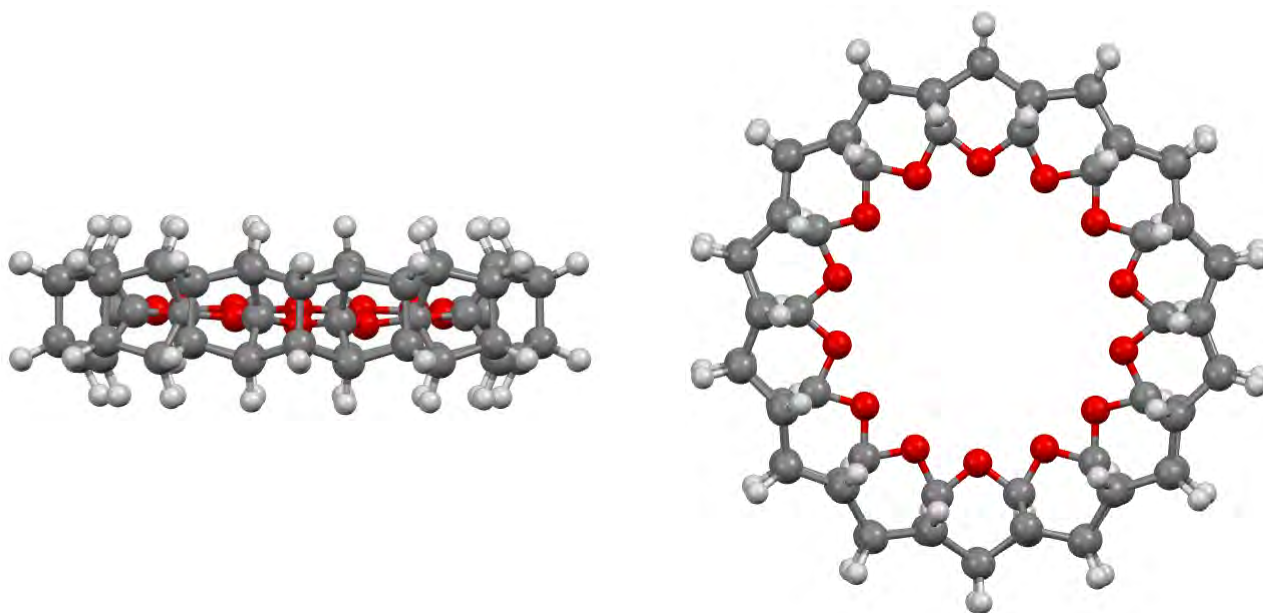
¹ www.zyvex.com/nanotech/feynman.html

Łożysko Drexlera

Fizyk amerykański Kim Eric Drexler w roku 1986 wydał książkę „Engines of Creation”, w której po raz pierwszy użył słowa nanotechnologia. W 1992 w książce *Nanosystems²* zaproponował projekt nanołożyska molekularnego zbudowanego z dwóch cząsteczek – wału (Rys. 1) i tulei (Rys. 2). Zmontowane łożysko widoczne jest na Rys. 3.

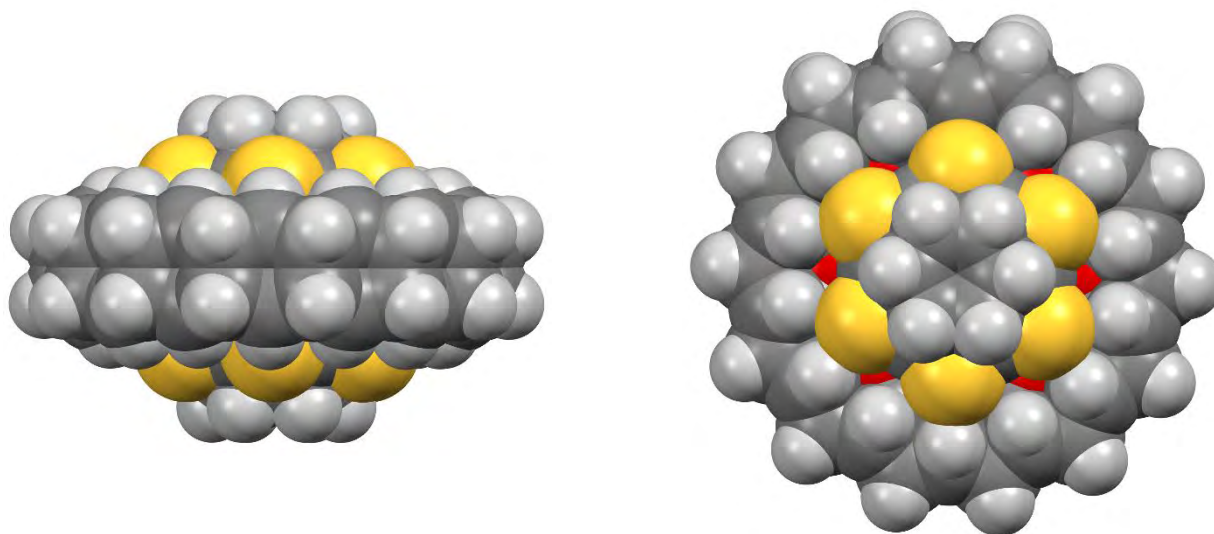


Rys. 1. Wał łożyska według projektu Drexlera. Przedstawiona w dwóch rzutach geometria reprezentuje minimum energii pola siłowego MM+. Struktura posiada sześciokrotną oś symetrii i zbudowana jest z 66 atomów ($C_{36}H_{12}O_6S_{12}$). Atomy węgla zaznaczono kolorem szarym, atomy wodoru białym, atomy tlenu czerwonym, a atomy siarki żółtym.



Rys. 2. Tuleja łożyska według projektu K. E. Drexlera. Przedstawiona w dwóch rzutach geometria reprezentuje minimum energii pola siłowego MM+. Struktura posiada w przybliżeniu czternastokrotną oś symetrii i zbudowana jest ze 140 atomów ($C_{70}H_{56}O_{14}$). Oznaczenia atomów są analogiczne jak na Rys. 1.

² *Nanosystems – Molecular Machinery, Manufacturing and Computation: John Wiley & Sons, Inc., 1992*



Rys. 3. Zmontowane łożysko według projektu Drexlera. Przedstawiona w dwóch rzutach geometria reprezentuje minimum energii pola siłowego MM+. Struktura posiada w przybliżeniu czternastokrotną oś symetrii i zbudowana jest z 206 atomów. Oznaczenia atomów są analogiczne jak na Rys. 1.

Zauważ, że symetrie obrotowe wału (sześciokrotna) i tulei (czternastokrotna) są różne. Zapewnia to niskie wartości bariery energii w trakcie rotacji tulei względem wału.

Zadania do wykonania

1. Zapoznaj się z obsługą programu ModelBuilder w zakresie budowania cząsteczek oraz poszukiwania ich stabilnych konformacji metodą MM+.
2. Dla nabrania wprawy w posługiwaniu się pakietem HyperChem™ zbuduj samodzielnie model wału i tulei wg projektu Drexlera. Struktury zoptymalizuj metodą MM+. Oblicz energie potencjalne zoptymalizowanych układów oraz zamieść ich graficzną wizualizację. ④
3. Zmontuj łożysko z części składowych i dokonaj jego optymalizacji. Oblicz zmianę energii układu podczas montażu. Gotowe łożysko przedstaw w postaci graficznej. ②
4. Oblicz energie potencjalne łożyska dokonując obrotu wału w tulei o 360° w krokach co 5° . Uzyskane (72) wartości zestaw w tabeli oraz na wykresie. ④
5. Zaproponuj własny projekt wstępny łożyska w rozdzielczości atomowej. Struktury walu i tulei zoptymalizuj metodą MM+. Oblicz energie potencjalne zoptymalizowanych układów, zamieść ich graficzną wizualizację i podaj wzory sumaryczne oraz przybliżoną symetrię. ⑥
6. Dla własnego projektu wykonaj zadania opisane w punktach 3 i 4. ⑥
7. Przedyskutuj wyniki uzyskane w punktach 3 i 4 dla własnego projektu porównując je z wynikami dla projektu Drexlera. ②
8. Przedyskutuj ewentualne możliwości eksperymentalnej realizacji projektu. ①