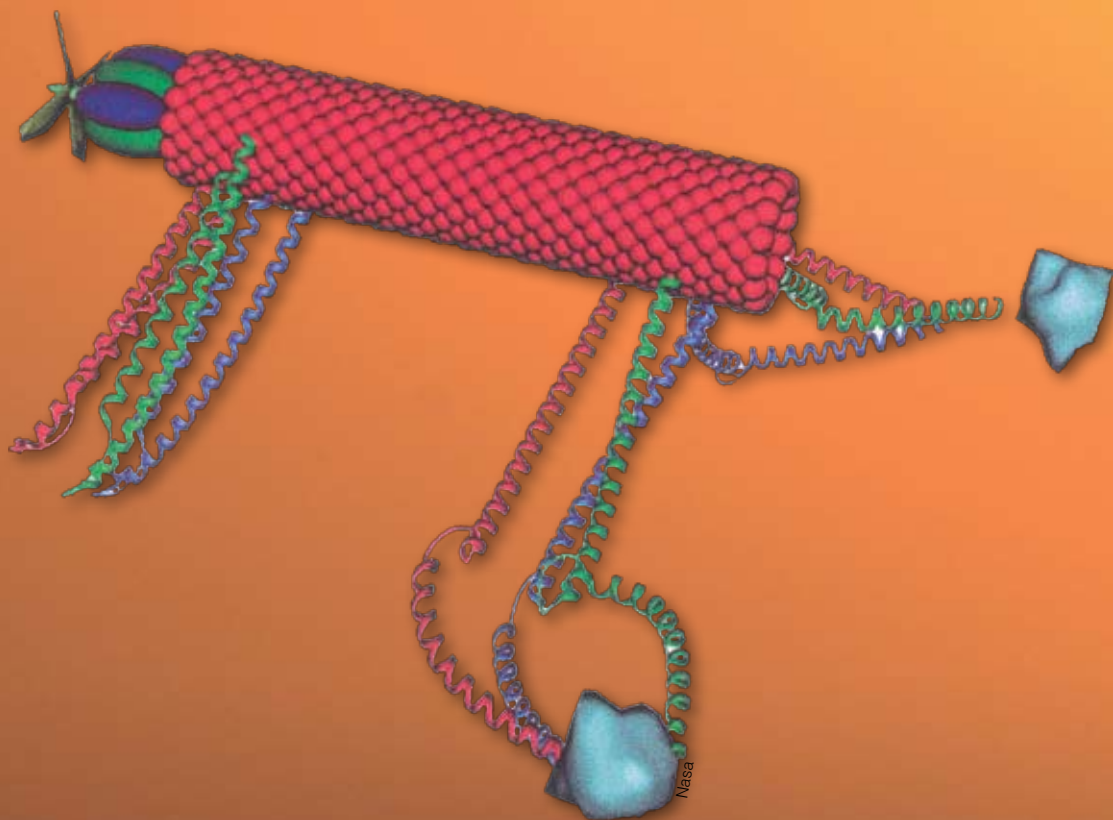


Molekyylikoneet ovat
vasta tiensä alussa,
mutta kehitys kulkee
kohti nanorotteja.



Molekyylikoneiden *aamunkoitto*

Kun molekyylikoneiden valmistus ennen oli luonnon yksinoikeus, nyt myös ihminen on alkanut tehdä niitä laboratorioissaan. Tulevaisuuden kehittyneemmät nanorobotit merkitsevät jo uuden teknologian aikakautta.

Jari Koponen

Yli neljän miljardin vuoden evoluutiossa luonto on kehittänyt molekyylikoneita, joiden toiminnan tulosta on maapallon koko elämä.

Molekyylikoneet koodaavat perimää, huolehtivat solujen toiminnoista ja liikkuttavat lihaksia.

Molekyylikoneen muodostavat myös vaikkapa kasvien fotosynteesikoneisto ja ATP-syntaasimolekyylit. Edellisessä auringon säteily muuttuu kemialliseksi sidosenergiaksi, jonka jakelun oikeisiin kohteisiin soluissa hoitaa jälkimmäinen.

Luonnon molekyylikoneet ovat itsejärjestyviä ja tuottavat hierarkkisesti rakentuvia, dynaamisia systeemejä. Jokaiselle omakohtainen esimerkki on oma kehitys munasolusta yksilöksi.

Ihmisen valmistamilta koneilta puuttuvat luonnon koneiden ominaisuudet, myös ympäristöön mukautuminen ja evoluutio.

Miksi sitten ryhtyä rakentamaan keinotekoisia molekyylikoneita? Nyky maailmassa vastaus on ilmeinen.

Ihminen on ajamassa itseään ja muuta

luontoa umpikujan. Tehottomasta, saattavasta ja liikaa luonnonvaroja käyttävästä tekniikasta on pakko siirtyä osittain molekyylikoneteknologiaan. Muutos ei ole ainoastaan järkevä vaan myös välttämätön.

Tehon mestareita

Omia molekyylikoneitaan suunnitteleva ihminen voi joissakin tapauksissa käyttää hyväksi luonnon koneistoja.

Kasvien geenejä manipuloimalla hän voi parantaa niiden ominaisuuksia ja saada parempia satoja. Lääketieteessä hän kykenee tekemään luonnon omasta rakennemateriaalista eli proteiineista uudenlaisia molekyylikoneita, joilla on elimistön kaltaisissa biologisissa systeemeissä haluttuja hyödyllisiä vaikutuksia.

Biologisesta ympäristöstään irrotetut molekyylikoneet eivät kuitenkaan toimi kaikissa teknisten sovellusten olosuhteissa. Silloin on valmistettava sopivista molekyyleistä keinotekoisia koneita, joi-

den toimintaperiaatteet silti ovat samat kuin luonnollisten.

Luonnon ja ihmisen tekemien molekyylikoneiden väliin jäävät hybridikoneet, jotka yhdistävät molempien ominaisuuksia. Hyvä esimerkki on Cornellin yliopistossa rakennettu hybridi, joka valmistettiin istuttamalla ATP-syntaasi nikkelialustalle ja kiinnittämällä nikkelinen nanolanka syntaasin pyörivän keskusosan päähän.

Näin saatiin aikaan biologisen molekyylikoneen pyörittämä metallipropelli. Mikroskoopin kautta tapahtuma onnistuttiin tallentamaan videolle.

Varsinainen yllätys oli syntaasin tuotama vääntövoima. Kun sitä ja auton moottorin vääntövoimaa tilavuusyksikköä kohden verrattiin, auto jäi kirkaasti kakkoseksi.

Juuri se on molekyylikoneiden salaisuus: tehokkuudessa ne päihittävät nykyteknologiamme tuotteet mennessään.

Kirjoittaja on nanoteknologiaan erikoistunut kemisti ja vapaa toimittaja.

Scanstockphoto

Jatkuu seuraavalla aukeamalla.



Molekyyleillä on omat pelisäännöt

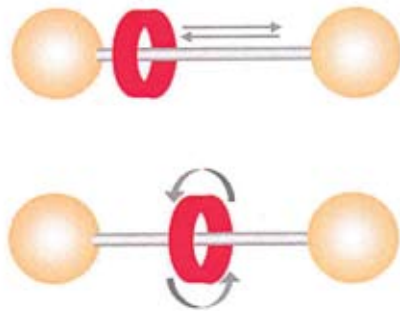
Molekyylien maailmassa merkitsevät asiat, joita suuremmissa kokoluokissa ei tarvitse ottaa huomioon.

Koska lämpö- eli Brownin liike heiluttelee molekyylejä jatkuvasti satunnaisesti suuntiin, molekyylikoneiden toimimisen ensimmäinen edellytys on saada liikkuminen hallintaan. Molekyylin atomit ovat kovalenttisesti toisiinsa sidottuja, mutta vuorovaikutuksia varten tarvitaan myös heikkoja, helposti syntyviä ja purkautuvia liitoksia. Niitä saadaan aikaan muun muassa vety- ja van der Waals -sidoksilla.

Toimiakseen molekyylikoneet tarvitsevat energiaa, jonka ne yleensä saavat valosta, kemiallisesti reagoivasta yhdisteestä tai elektronin lisäämisestä tai poistamisesta.

Kun kone on useimmiten kiinnitettävä pintaan, keskeiseksi voimanlähteeksi nousee valo. Ehtymätöntä lähdettä kannattaa hyödyntää myös tulevaisuuden teknologiassa.

Koska koneen on toiminnon jälkeen



Katenaanien (vas.) ja rotaksaanien rakenteet kaaviona. Komponenttien lukumäärä esitetään muodossa: [2] katenaani, [3] rotaksaani jne.

Jari Koponen

palauduttava alkutilaansa, prosessin pitää olla mahdollisimman reversiibeli. Sellaisia ovat energian, elektronin ja protonin siirrot sekä tietyt isomerisoinnit ja koordinaatioreaktiot.

Koneita voidaan rakentaa monenlaisista molekyyl- ja supramolekyylilyhdistelmistä. Käytetyimmiksi ovat valikoituneet rotaksaanit ja katenaanit, jotka koostuvat kahdesta tai useammasta toisiinsa mekaanisesti kytkeytyneestä molekyylisestä. Sellaisessa systeemissä koneen vaatimukset voidaan toteuttaa suhteellisen yksinkertaisesti.

Mekaaninen sidos sallii komponenteille suuren valikoiman erilaisia asemia ilman systeemin stabiilisuuden muutoksia. Toisiinsa kytkeytyjen molekyylien liikettä rajoittaa jo niiden rakenne, joten hallittu liike on helppo saada aikaan.

Lisäksi komponentteihin voidaan luoda alueita, joiden avulla heikot vuorovaikutukset lukitsevat ne paikoilleen. Lukitus on myös purettavissa.

Prototyypeistä kohti sovelluksia

Koska joidenkin rotaksaanien sähköjohtavuus vaihtelee renkaan siirtymässä rungolla, amerikkalainen **J. Fraser Stoddard** kumppaneineen keksi hyödyntää niitä sähköisinä kytkiminä. Pari vuotta sitten ryhmä onnistui rakentamaan rotaksaaneihin perustuvan 160 kilobitin muistipiiriin.

Rotaksaanien pienuuden ansiosta muistin pakkaustiheys piirissä on vaikuttava, 10^{11} bittinä neliösenttimetrillä. Sellaisiin lukuihin ei nykymuisteilla päästä.

Stoddardin piiri on tosin vasta prototyyppi, kuten kaikki muutkin nykyiset molekyylimoottorit. Rotaksaanien toimivuus on osoitettu esimerkiksi venttiileinä. Demonstraatiossa kiinteän materiaalin huokoset avataan ja suljetaan niiden ympärille kiinnitettyjen rotaksaanien avulla.

Nanoautosta nanorobottiin

Alkeellisia molekyylikoneita on valmistettu muistakin yhdisteistä kuin rotaksaaneista ja katenaaneista.

Joku vuosi sitten kohua herätti yhdysvaltalaisessa Ricen yliopistossa rakennettu nanoauto, jonka pyörinä toimivat fullereenit ja runkorakenteena oligo(fenyylityleeni)-ketju. Kun kullattua pintaa lämmitetään, sille asetettu auto lähtee liikkeelle. Salaisuutena ovat lämmön vaikutuksesta pyörivät hiilisisidokset, jotka liittävät fullereenit runkoon.

Monimutkaisempia, luotettavia ja teollisesti tuotettavia keinoitekoisia molekyylilaitteita ei ole vielä kyennyt val-



Pastor Jalkanen
Jari Koponen

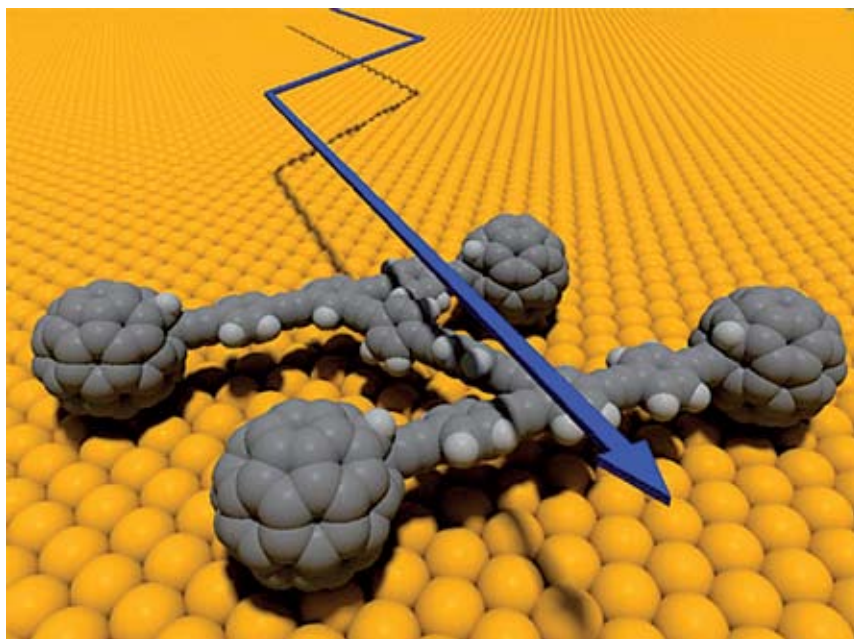
Université Louis Pasteurin professori Jean-Pierre Sauvage (vas.) kuuluu tärkeimpiin rotaksaanien ja katenaanien synteisien kehittäjiin. Molekyylikoneiden kehittäjänä tunnettu professori David A. Leigh Edinburghin yliopistosta on eloisa luennoija, joka ei kaihda taikatempujenkaan käyttöä.

mistamaan kukaan. Sellaisten tekeminen edellyttää kiperien kysymysten ratkaisemista.

Rakentamatta ovat vielä koneet, joilla on nopea liikesykli, jotka kykenevät erilaisiin liikeratoihin, jotka pystyvät kuljettamaan kuormia ja jotka kestävät käytössä pitkään.

Molekyylikoneet ja -moottorit tulee lisäksi voida liittää erilaisiin nanorakenteisiin, myös epäorgaanisista materiaaleista valmistettuihin. Kun tälle tasolle päästään, voidaan jo tehdä nanoroboteiksi kutsuttavia laitteita.

Nanoauton pyörät ovat fulle-reeneja ja runko muodostuu hiiliketjumolekyylistä. Kuljettajalle asetettu auto liikkuu, kun pintaa lämmitetään.



Yasuhiro Shirai

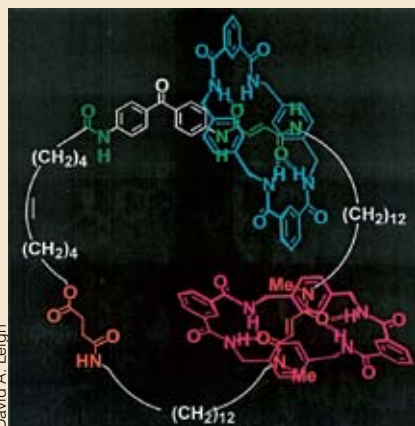
Eteenpäin tai ympyrää

Molekyylikoneen liike voi olla joko ympyrä- tai suoraviivaista. Katenaaneilla rengas yritetään saada liikkumaan pitkin toisen renkaan kehää täydet 360 astetta.

Päämäärään on päässyt [3] katenaanilla englantilaisen professorin **David A. Leighin** ryhmä, joka molekyylikoneiden kehittäjänä kuuluu alan huippuihin.

Suoritukseen tarvittiin neljä ”välipysäkkiä” liikkumattomalla renkaalla, joten täysi kierros tapahtui neljässä osassa, Leigh kertoi Jyväskylässä syksyllä järjestetyillä Nanotieteen päivillä.

Vaikka Leighin kiertoliikemoottori edustaa kehityksen kärkeä, siitä on toistaiseksi vain osoittamaan periaatteen



David A. Leigh

[3] katenaani, jossa suuremmalla renkaalla on kuvassa värillisinä näkyvät neljä ”pysäkkiä”. Kaksi pienempää rengasta saadaan kulkemaan pysäkillä toiselle perättäisillä valo- tai kemiallisilla impulsseilla ja tekemään siten täyden kierroksen. Liike voidaan tehdä toiseen suuntaan kääntämällä impulsijärjestys päinvastaiseksi.

toimivuus. Täyteen kierrokseen koneelta hupenee 17 minuuttia, ja kiertosyklin aikana toimii vain vajaa viidennes moottoreista.

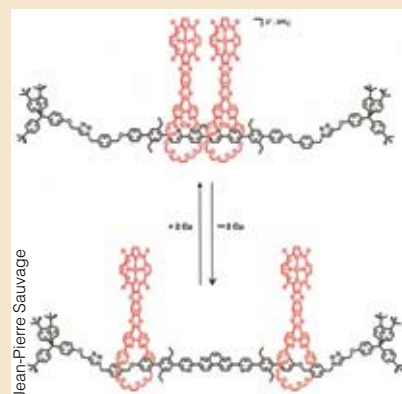
Rotaksaaneilla on jo päästy pidemmälle. Kun ensimmäisissä kokeissa renkaan kierto akselin ympäri saattoi viedä jopa tunteja, uusimmilla viidennen polven rotaksaaneilla aika mitataan mikro- ja milisekunneissa.

Eniten rotaksaaneja on kuitenkin käytetty lineaariseen liikkeeseen, jolloin rengasosa yleensä liikkuu akselilla kahden paikan välillä.

Esimerkki lineaarisen liikkeen molekyylikoneesta on toisen pioneerin, ranskalaisen **Jean-Pierre Sauvagen** ryhmän valmistama [3] rotaksaani, jonka molempiin renkasiin on liitetty sinkki-porfyyriinilevyt. Rotaksaani toimii joko molekyylipuristimena tai molekyylilihaksena.

Sauvage ryhmineen on kehittänyt menetelmiä, joiden ansiosta rotaksaaniin ja katenaanien synteesien teko on helppoa ja saannot huippuluokkaa.

Hänen ansiostaan tutkimus on harpanut pitkän askeleen 1980-luvulta, jolloin synteesit olivat hankalia, pitkäkestoisia ja saannoltaan surkeita ja yhdisteet pelk-



Jean-Pierre Sauvage

kiä pienen piirin harrastamia akateemisia kummajaisia.

Kollektiivisellä voimalla

Sekä Leighin että Sauvagen molekyylikoneet toimivat liuksissa, joiden käytämisessä on huonojakin puolia.

Koska molekyylimoottorit liikkuvat liuksissa vapaasti, ei ole perustasoa, jonka suhteen liike molekyylissä tapahtuu. Toiseksi molekyylin toiminta ei ole yhtenäiseksi tahdistettua. Myös Brownin liikkeen vaikutus on liuksissa suuri.

Koska useimmat sovellukset edellyttävät paikallaan pysyviä molekyylimoottoreita, edullisinta on niiden kiinnittäminen rajapinnoille tai kiinteälle alustalle. Pinta toimii vertaustasona, yksikköjen toiminta voidaan tahdistaa ja lämpöliikkeen vaikutus minimoituu.

Pintaan kiinnitettyjen molekyylikoneiden voiman voi nähdä paljain silmin Leighin laboratoriossa tehdyssä kokeessa, jossa kulta pinnoitettiin rotaksaaneilla fysisorption avulla. Rotaksaaniin rungolle aiheutettiin uv-valolla trans-cis-isomerisaatio, jolloin rengasosa liikkui toiseen asemaan rungolla.

Tämä vaikuttaa pintaenergiaan, jolloin liikkuvien renkaiden yhteinen voima riittää työntämään pinnalle asetettua mikrolitran nestepisaraa eteenpäin jopa ylämäkeen. Vaikuttava näyttö pikkuruisten tahdistettujen molekyylikoneiden mahdollisuuksista. □

[3] rotaksaani, jossa rengasosien liike saadaan aikaan lisäämällä rakenteeseen tai poistamalla siitä kaksi kupariatomia. Molekyyli voi toimia molekyylipuristimena tai molekyylilihaksena. Molekyylin synteesissä on 35 vaihetta.