



Περιεχόμενα

1. Διεθνή Συνέδρια & Διεθνή Σχολεία στις Νανοτεχνολογίες τον Ιούλιο στη Θεσσαλονίκη και Χαλκιδική.....	1
2. Τα πρώτα διδακτορικά του N&N	
-“Μελέτη Ρύθμισης της Παραγωγής και της Δομής Πολυμερών στο Βακτήριο <i>Thermus Thermophilus</i> : Νανοτεχνολογικές Εφαρμογές”.....	4
- “Οπτικές Λαβίδες: Επιστημονική Φαντασία ή Πραγματικότητα;”.....	6
- “FRET: Ένας μοριακός χάρακας στα χέρια μας”.....	7
3. Συνέντευξη με τον Πρόεδρο του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών Καθηγητή κ. Α. Κυριακίδη.....	9
4. Υπολογιστικές Μέθοδοι και Εργαλεία στη Νανοκλίμακα	13

1. ΔΙΕΘΝΗ ΣΥΝΕΔΡΙΑ & ΔΙΕΘΝΗ ΣΧΟΛΕΙΑ ΣΤΙΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΕΣ ΤΟΝ ΙΟΥΛΙΟ ΣΤΗ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗ ΚΑΙ ΧΑΛΚΙΔΙΚΗ



Για έκτη συνεχή χρονιά το Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, θα αποτελέσει πόλο έλξης για τη Διεθνή Επιστημονική Κοινότητα με τη διοργάνωση τριών σημαντικών επιστημονικών γεγονότων τα οποία θα συγκεντρώσουν ένα μεγάλο αριθμό επιστημόνων από όλη την υδρόγειο, οι οποίοι θα παρουσιάσουν τα πιο πρόσφατα αποτελέσματα στους πλέον σύγχρονους τομείς της επιστήμης και τεχνολογίας.

Καταρχήν, το “6th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN09)” θα πραγματοποιηθεί στις 13-15 Ιουλίου 2009, με κύριους παρευρισκομένους σε αυτό διακεκριμένους διεθνώς Επιστήμονες και Ερευνητές, καθώς και Στελέχη Εταιριών υψηλής τεχνολογίας στον τομέα των Νανοεπιστημών και Νανοτεχνολογιών, με τις αντίστοιχες ομιλίες. Σκοπός του Συνεδρίου είναι να προωθήσει

την επικοινωνία και την αλληλεπίδραση μεταξύ διαφορετικών επιστημονικών και βιομηχανικών πεδίων με κοινό παρανομαστή τον φλέγοντα αυτό τομέα, καθώς και την ενημέρωση για τις τελευταίες εξελίξεις μέσα από ερευνητικά αποτελέσματα τα οποία θα γνωστοποιηθούν στις προσκεκλημένες και μη ομιλίες και σε παρουσιάσεις αφίσας.

Η επιτυχία του Συνεδρίου τα προηγούμενα έτη, με τους συμμετέχοντες στο NN08 να φθάνουν τους 260 από 43 χώρες επιβραβεύει κι ενθαρρύνει για ακόμη μια χρονιά αυτή την προσπάθεια προς τη διάδοση και την εξέλιξη των N&N. Άλλωστε, η καθιερωμένη βράβευση στο τέλος του Συνεδρίου των νέων ερευνητών και υποψήφιων διδασκόντων που επέδειξαν καινοτόμα στοιχεία στις εργασίες τους είναι καταφανές παράδειγμα αυτής της πορείας.

Οι θεματικές ενότητες στις οποίες θα στηριχθεί η ροή του Συνεδρίου είναι οι εξής :

- Οργανικά Ηλεκτρονικά και Νανοηλεκτρονική
- Νανοβιοτεχνολογία και Νανοϊατρική
- Λεπτά Υμένια, Μετα-υλικά και Spintronics
- Νανοϋλικά και Νανομηχανική
- Νανοτεχνολογία στην Ενέργεια και το Περιβάλλον
- Υπολογιστική μοντελοποίηση στη Νανοκλίμακα
- Νανοτεχνολογία στην Ασφάλεια & την Εκπαίδευση
- Νανομετρολογία & Επιστημονικά Όργανα
- Εμπορευματοποίηση της Νανοτεχνολογίας

Λίγο πριν και παράλληλα με το Συνέδριο θα διεξαχθεί το **“3rd International Summer School on Nanosciences & Nanotechnologies (SS-NN09)”** από τις 11 μέχρι τις 17 Ιουλίου 2009, όπου θα πραγματοποιηθούν περαιτέρω διαλέξεις στα παρακάτω πεδία:

- Οργανικά Ηλεκτρονικά και Νανοηλεκτρονική
- Νανοβιοτεχνολογία και Νανοϊατρική
- Υλικά – Ιδιότητες
- Τεχνικές και Υπολογισμοί στη Νανοκλίμακα
- Λεπτά Υμένια και Τεχνολογία Νανοϋλικών, Νανομετρολογία

αλλά και ξεναγήσεις σε εργαστηριακούς χώρους όπου παρουσιάζονται πρακτικές εφαρμογές της Νανοτεχνολογίας στους συμμετέχοντες. Ιδιαίτερη έμφαση, φέτος, θα δοθεί στους τομείς των Οργανικών Ηλεκτρονικών και της Νανοβιοτεχνολογίας με τη δημιουργία δύο κατευθύνσεων όπου θα δίνονται πιο εστιασμένες διαλέξεις, παράλληλα. Στόχος του **SS-NN09** είναι, κυρίως, η κατάρτιση νέων ερευνητών και σπουδαστών στα ραγδαία αναπτυσσόμενα πεδία των N&N.

Τα NN09 και SS-NN09 διοργανώνονται από το “Διατμηματικό-Διεπιστημονικό Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών Νανοεπιστήμες και Νανοτεχνολογίες”, το θεματικό δίκτυο “NANONET” και το “Εργαστήριο Λεπτών Υμενίων, Νανοσυστημάτων και Νανομετρολογίας (LTFN)”.



Την επιστημονική δραστηριότητα του Α.Π.Θ. αυτό το καλοκαίρι, συμπληρώνει ακόμη μία καίρια διοργάνωση το **“2nd International Symposium on Flexible Organic Electronics (IS-FOE09)”** το οποίο θα πραγματοποιηθεί το διάστημα 8-10 Ιουλίου 2009 στο Ξενοδοχείο Πόρτο Καρράς στη Χαλκιδική. Το IS-FOE έχει καθιερωθεί ως το 2^ο κύριο επιστημονικό και ερευνητικό γεγονός διεθνώς στον τομέα των Εύκαμπτων Οργανικών Ηλεκτρονικών. Το Συμπόσιο διοργανώνεται από το “Εργαστήριο Λεπτών Υμενίων-Νανοσυστημάτων και Νανομετρολογίας (LTFN)” του Α.Π.Θ. και από τον “Plastic Electronics Foundation” ενώ υποστηρίζεται από τα Ευρωπαϊκά Ερευνητικά Προγράμματα OLATronics, PolyNet και OPERA. Φέτος, πραγματοποιείται για δεύτερη συνεχή χρονιά, με συμμετοχή που ξεπερνά τις 110 εργασίες από 27 χώρες και αναμένεται να παρουσιάσει ακόμα μεγαλύτερη επιτυχία από το IS-FOE08, που το καθιέρωσε παγκοσμίως.

Σκοπός του **IS-FOE09** είναι να φέρει σε επαφή επιστήμονες, ερευνητές, μηχανικούς και στελέχη της βιομηχανίας που ασχολούνται ενεργά με την έρευνα, την ανάπτυξη, την παραγωγή και την εμπορευματοποίηση στο πεδίο των Εύκαμπτων Οργανικών Ηλεκτρονικών (ανόργανα/οργανικά υλικά, εύκαμπτα υποστρώματα, παρασκευαστικές μέθοδοι, σχεδιασμός κυκλωμάτων, εύκαμπτες συσκευές, ενσωματώσεις συστημάτων κι εφαρμογές) ώστε να συζητηθούν οι τελευταίες εξελίξεις σε αυτό τον ραγδαία αναπτυσσόμενο τομέα.

Ο θεματικός κορμός του **IS-FOE09** περιστρέφεται γύρω από τις εξής ενότητες:

- Οργανικά Ηλεκτρονικά υλικά (μικρά μόρια και πολυμερή)
- Οργανικά Πολυλειτουργικά Υλικά
- Οργανικά, ανόργανα και υβριδικά υλικά και συστήματα
- Εύκαμπτα υποστρώματα και ενθυλάκωση μεθόδων και υλικών
- Μοριακά Ηλεκτρονικά και Φωτονικά
- Αυτοοργανούμενα μόρια και συστήματα
- Θεωρία και Μοντελοποίηση (υλικά, συστατικά και συσκευές)
- Μέθοδοι παρασκευής (τεχνολογία printing, τεχνολογία κενού, χημική ανάπτυξη) και διαδικασίες ελέγχου ποιότητας
- Εύκαμπτες οθόνες και φωτισμός
- Εύκαμπτα ηλιακά κύτταρα και μπαταρίες
- Εύκαμπτα κυκλώματα και αισθητήρες
- Εύκαμπτα RFIDs και υφάσματα

Το πρόγραμμα του IS-FOE09 αποτελείται από προσκεκλημένες ομιλίες, παρουσιάσεις αφίσας, εκθέσεις

από διάφορες εταιρίες, συζητήσεις, όπως επίσης και από μια ειδική θεματική ενότητα αφιερωμένη στην παρουσίαση των Ερευνητικών Προγραμμάτων και της Στρατηγικής σχετικά με την έρευνα σε Ευρώπη, ΗΠΑ και Ασία στο πεδίο των Εύκαμπτων Οργανικών Ηλεκτρονικών από τους αντίστοιχους εκπροσώπους. Η πληθώρα των θεμάτων στο SS-NN09 και ISFOE09 και η σημασία τους για την εποχή μας αναμένεται να προσελκύσει το ενδιαφέρον διεθνώς, όπως άλλωστε έχουν επιβεβαιώσει τα προηγούμενα έτη. Έτσι, τα γεγονότα αυτά αναβαθμίζουν τον ρόλο του ΑΠΘ ως ένα αναγνωρισμένο κέντρο Επιστήμης και Τεχνολογίας το οποίο παίζει σημαντικό ρόλο στην περιοχή της νοτιο-ανατολικής Ευρώπης.

Σας περιμένουμε όλους εκεί!

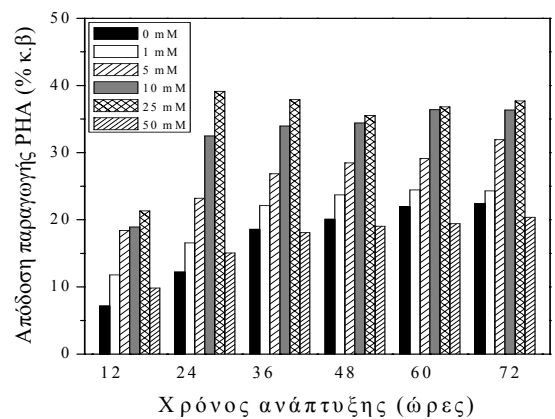


2. ΤΑ ΠΡΩΤΑ ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΑ ΤΟΥ Ν&Ν “ΜΕΛΕΤΗ ΡΥΘΜΙΣΗΣ ΤΗΣ ΠΑΡΑΓΩΓΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΔΟΜΗΣ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ ΣΤΟ ΒΑΚΤΗΡΙΟ *THERMUS THERMOPHILUS*: ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ”

Το *Thermus thermophilus* είναι ένα θερμόφιλο αρ-
χαιοβακτήριο, το οποίο έχει μελετηθεί σε πολύ μικρό
βαθμό, καθώς η απομόνωση του έγινε μόλις το
1974. Για πάνω από μία εικοσαετία χρησιμοποιείται
για την παραγωγή θερμοσταθερών ενζύμων, με χα-
ρακτηριστικό παράδειγμα την DNA-πολυμεράση. Το
2003, αποδείχθηκε ότι το *T. thermophilus* παράγει
μία κατηγορία πολυμερών, τα πολυ-
υδροξυαλκανοϊκά (PHAs) τα οποία παρουσιάζουν
μεγάλο βιοτεχνολογικό ενδιαφέρον. Ένα χρόνο αρ-
γότερα, δημοσιεύτηκε το γονιδίωμα του *T. thermo-
philus*, άφησε, όμως, σημαντικά κενά και ελλείψεις,
καθώς παρουσιάζει ένα μεγάλο αριθμό ανοικτών
αναγνωστικών πλαισίων, ο οποίος κωδικοποιεί
πολλές υποθετικές πρωτεΐνες.

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της
μελέτης της ρύθμισης της παραγωγής των PHAs
στο *T. Thermophilus HB8*. Τα PHAs είναι αποθηκευ-
τικά υλικά ενέργειας και άνθρακα τα οποία συντίθε-
νται από πολλούς μικροοργανισμούς όταν βρεθούν
σε κατάσταση μεταβολικού στρες- όταν δηλαδή πα-
ρατηρείται έλλειψη ενός απαραίτητου συστατικού για
την ανάπτυξη του κυττάρου, κυρίως αζώτου ή φω-
σφόρου, ενώ παράλληλα είναι διαθέσιμη σε περισ-
σσεια κάποια πηγή άνθρακα. Αρχικά, εξετάστηκε η
επίδραση της συγκέντρωσης των φωσφορικών ιόν-
των στη παραγωγή των PHA στο *T. thermophilus*,
σε θρεπτικά μέσα ελαχίστων αλάτων τα οποία πε-
ριείχαν γλυκονικό νάτριο ως πηγή άνθρακα και πε-
ρίσσεια αμμωνιακών ιόντων. Καθώς η αρχική συ-
γκέντρωση των φωσφορικών ιόντων στο μέσο ανά-
πτυξης αυξανόταν από τα 0 στα 25 mM παρατηρή-
θηκε αύξηση του παραγόμενου πολυμερούς. Μεγα-

λύτερες συγκεντρώσεις φωσφορικών ιόντων οδήγη-
σαν στη συσσώρευση του πολυμερούς (σχήμα 1).

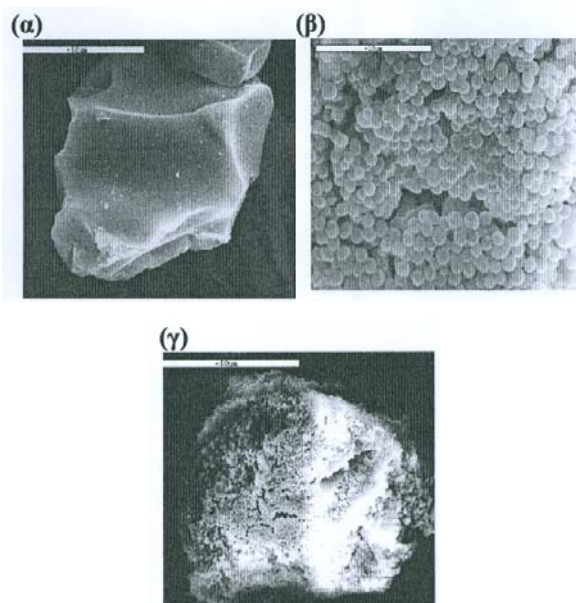


Σχήμα 1. Επίδραση της αρχικής συγκέντρωσης των φω-
σφορικών ιόντων και του χρόνου ανάπτυξης στην απόδο-
ση της παραγωγής PHA στο *T. thermophilus*. Το βακτήριο
αναπτύχθηκε σε καλλιέργειες που περιείχαν 1,5% w/v
γλυκονικό νάτριο ως πηγή άνθρακα και διαφορετικές αρχι-
κές συγκεντρώσεις φωσφορικών ιόντων.

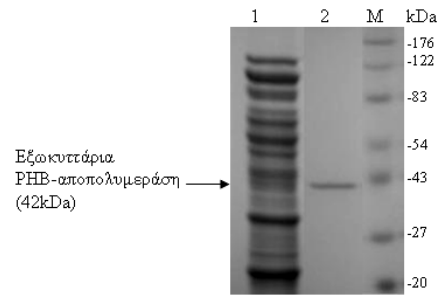
Το παραγόμενο PHA, μοριακού βάρους περίπου
280.000, διαπιστώθηκε ότι είναι ετεροπολυμερές, το
οποίο αποτελείται κυρίως από το 3-
υδροξυδεκανοϊκό (3HD) σε ποσοστό 61%. Σε μικρό-
τερο ποσοστό ανιχνευτήκαν τα μονομερή 3-
υδροξυβουτυρικό (3HB, 5mol%), 3-υδροξυβαλερικό
(3HV, 8mol%) και 3-υδροξυοκτανοϊκό (3HO, 25
mol%). Τα σημεία τήξεως και υαλώδους μεταπτώ-
σεως βρέθηκαν περίπου ίσα με 175,6°C και 70°C
αντίστοιχα, ενώ το ποσοστό κρυσταλλικότητας ήταν
περίπου 40% .

Στη συνέχεια, μελετήθηκε η παραγωγή της PHB αποπολυμεράσης από το *T. thermophilus*. Η ικανότητα του βακτηρίου να αναπτύσσεται και να αποικοδομεί εξωκυττάρια το PHB διαπιστώθηκε αρχικά σε τρυβλία τα οποία περιείχαν τροποποιημένο μέσο ανάπτυξης και PHB ως πηγή άνθρακα. Οι διαυγείς ζώνες γύρω από τις αποικίες του *T. thermophilus* αποτελούν ένδειξη της έκκρισης μίας τουλάχιστον PHB αποπολυμεράσης.

Για την απομόνωση της εξωκυττάριας PHB αποπολυμεράσης του *T. thermophilus* αναπτύχθηκε ένα καινούργιο χρωματογραφικό υλικό, όπου σε σφαιρίδια πυριτίου έγινε επικάλυψη με σκόνη κρυσταλλικού PHB (σχήμα 2). Με τη χρήση του υλικού αυτού, η εξωκυττάρια PHB αποπολυμεράση με μοριακή μάζα 42 kDa καθарίστηκε μέχρι ομοιογένειας (σχήμα 3).



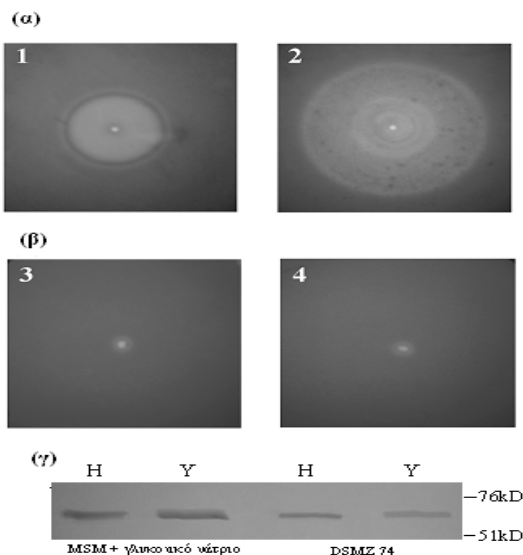
Σχήμα 2. Εικόνες σαρωτικής ηλεκτρονικής μικροσκοπίας. (α) Σφαιρίδιο πυριτίου, (β) κρυσταλλικό PHB (γ) επικάλυψη σφαιριδίου πυριτίου με PHB



Σχήμα 3. SDS-ηλεκτροφόρηση σε πηκτή πολυακρυλαμιδίου και χρώση με AgNO_3 της καθαρισμένης PHB αποπολυμεράσης. Διαδρομές: 1: Αρχικό εξωκυττάριο εκχύλισμα, 2: Έκλουση από σφαιρίδια silica-PHB, M: μάρτυρες μοριακής μάζας

Το γονίδιο το οποίο κωδικοποιεί την εξωκυττάρια PHB αποπολυμεράση ταυτοποιήθηκε ως το TTHA0199 του *T. thermophilus* HB8. Η αμινοξική ακολουθία του προϊόντος του γονιδίου TTHA0199 παρουσιάζει σημαντικές ομοιότητες με εξωκυττάριας PHB αποπολυμεράσες άλλων στελεχών. Παράλληλα, στην αμινοξική ακολουθία της πρωτεΐνης που κωδικοποιείται από το γονίδιο TTHA0199, ταυτοποιήθηκε η καταλυτική τριάδα αμινοξέων S_{203} , E_{329} , και H_{425} και το “κουτί λιπάσης” (GX_1SX_2G) το οποίο είναι χαρακτηριστικό για τις PHB αποπολυμεράσες και για άλλες υδρολάσες σερίνης. Έπειτα, προσδιορίστηκαν οι βέλτιστες συνθήκες pH, θερμοκρασίας και συγκέντρωσης υποστρώματος για τη δραστηριότητα του ενζύμου. Όπως αποδείχθηκε στη συνέχεια, η εξωκυττάρια PHB αποπολυμεράση λειτουργεί ως μία εξω-υδρολάση καθώς το μονομερές 3-υδροξυβουτυρικό ανιχνεύτηκε ως μοναδικό προϊόν κατά τη διάρκεια της ενζυμικής αποικοδόμησης του PHB.

Τέλος, μελετήθηκε η ικανότητα του *T. thermophilus* να παράγει μαστίγια και να κινείται σε χαμηλού ή υψηλού ιξώδους μέσα ανάπτυξης. Τα αποτελέσματα έδειξαν πως παρά το γεγονός ότι το *T. thermophilus* έχει την ικανότητα να κολυμπάει σε υγρές ή ημίρρευστες καλλιέργειες, δε διαθέτει την ικανότητα της μεταναστευτικής κίνησης όταν μεταφέρεται σε στερεά μέσα ανάπτυξης (σχήμα 4).



Σχήμα 4. Μελέτη κίνησης *T. thermophilus* μέσω κολύμβησης ή μαζικής μετανάστευσης. Για τη μελέτη της ικανότητας κολύμβησης ή μεταναστευτικής κίνησης ετοιμάστηκαν καλλιέργειες σε τρυβλία των οποίων η συγκέντρωση σε άγαρ ήταν 0,3% w/v (α) και 1,1% w/v (β) αντίστοιχα και περιείχαν είτε θρεπτικό μέσο ελαχίστων αλάτων (MSM) και 1,5 w/v γλυκονικό νάτριο ως πηγή άνθρακα (1) είτε θρεπτικό μέσο DSMZ-74 (2). Αποτελέσματα ανοσοαποτύπωσης με το αντίσωμα έναντι της φλαγγελίνης δειγμάτων από εξωκυτάρια εκχυλίσματα τα οποία προέρχονται τις ημίρρευστες (H) και από τις υγρές καλλιέργειες (Y) (γ). Η θέση των πρωτεϊνικών μαρτύρων δίνεται στα δεξιά.

Η παραγωγή των μαστιγίων βρέθηκε ότι επάγεται σε συνθήκες περιορισμού των θρεπτικών συστατικών

και της πηγής άνθρακα. Η δομική πρωτεΐνη των μαστιγίων, η φλαγγελίνη, όπως επίσης και τα μαστίγια, απομονώθηκαν και μελετήθηκαν οι ιδιότητές τους. Με πειράματα ανοσοαποτύπωσης αποδείχθηκε ότι η φλαγγελίνη του *T. thermophilus* είναι μια πρωτεΐνη με μοριακή μάζα 62 kDa και στη συνέχεια αποδείχθηκε ότι είναι γλυκοσυλιωμένη. Επιπλέον, η αντίδρασή της με το ένζυμο N-γλυκοσιδάση F, είχε ως αποτέλεσμα την εμφάνιση, σε πειράματα ανοσοαποτύπωσης, μίας πρωτεΐνης στα 60 kDa. Η φλαγγελίνη βρέθηκε ότι είναι επιρρεπής έναντι πρωτεολυτικών ενζύμων, καθώς όταν αντέδρασε με το ένζυμο τρυψίνη είχε ως αποτέλεσμα τη δημιουργία αρχικά ενός θραύσματος στα 51 kDa κι έπειτα ενός δεύτερου, σταθερότερου στα 32 kDa. Η ανάλυση της αμινοξικής ακολουθίας της φλαγγελίνης του *T. thermophilus* φανέρωσε ομοιότητες με τις φλαγγελίνες της οικογένειας του *Bacillus* sp. και πολύ μεγάλη ομοιότητα με την αντίστοιχη πρωτεΐνη του *Thermotoga maritima*.

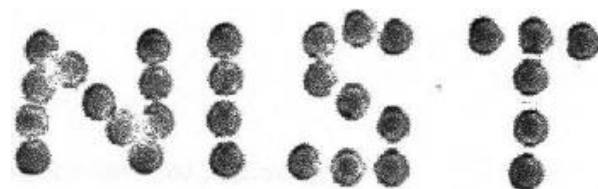
Χρήστος Παπανοφύτου
Διδάκτωρ του ΔΠΜΣ N&N

“ΟΠΤΙΚΕΣ ΛΑΒΙΔΕΣ: ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΗ ΦΑΝΤΑΣΙΑ Ή ΠΡΑΓΜΑΤΙΚΟΤΗΤΑ;”

Όλοι μας έχουμε δει κάποιο επεισόδιο του Star Trek όπου μία δέσμη φωτός έχει την δυνατότητα να ακινητοποιεί και να μετακινεί αντικείμενα κατά βούληση. Εντυπωσιακό μεν, όμως είναι απλά επιστημονική φαντασία. Ή μήπως όχι; Τουλάχιστον στον μικρόκοσμο, αποτελεί πλέον και πραγματικότητα.

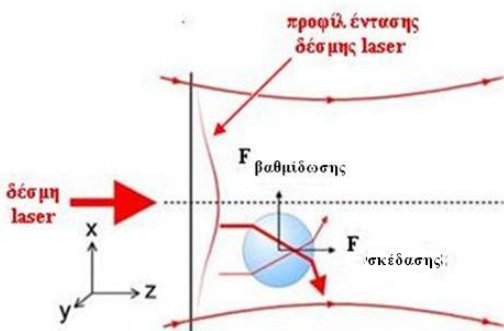
Το 1970, στα εργαστήρια της Bell, ο Arthur Ashkin κατάφερε να παγιδεύσει και να κινηθεί ουδέτερα σωματίδια σε επιθυμητές αποστάσεις με χρήση ε-

στιασμένων δεσμών laser. Οι οπτικές λαβίδες μόλις είχαν γεννηθεί.



Σχήμα 1: Τα αρχικά του Εθνικού Ιδρύματος Μέτρων και Σταθμών των ΗΠΑ φτιαγμένα από σφαιρίδια καουτσούκ διαμέτρου περίπου πέντε εκατομμυριοστών του μέτρου και τοποθετημένα με χρήση οπτικών λαβίδων.

Ο μηχανισμός των οπτικών λαβίδων βασίζεται στη χρήση μιας καλά εστιασμένης δέσμης laser, με την οποία επιτυγχάνεται η παγίδευση και ο χειρισμός σωματιδίων με διαστάσεις έως και εκατό νανομέτρων (εκατό δισεκατομμυριοστών του μέτρου). Είναι αξιοσημείωτο το γεγονός ότι η ίδια δέσμη laser, που χρησιμοποιείται για την παγίδευση των σωματιδίων, εισάγεται ταυτόχρονα σε ένα συμβατικό οπτικό μικροσκόπιο, με αποτέλεσμα να είναι δυνατή η παρατήρηση της κίνησης των σωματιδίων μέσα στο υγρό. Αρχικά, οι οπτικές λαβίδες βρήκαν εφαρμογή σε διαφανή διηλεκτρικά σωματίδια, με δείκτη διάθλασης μεγαλύτερο από αυτό του μέσου στο οποίο είναι εμβαπτισμένα.



Σχήμα 2: Αρχές οπτικής παγίδευσης διηλεκτρικής χάντρας με δέσμη laser. Άσκηση δύναμης αποκλειστικά λόγω της αλλαγής στην ορμή του προσπίπτοντος φωτός.

Η δύναμη που ασκείται σε ένα αντικείμενο και οφείλεται αποκλειστικά στην αλλαγή της ορμής του φω-

τός που προσπίπτει πάνω του, ονομάζεται πίεση ακτινοβολίας (radiation pressure). Σε μακροσκοπικά αντικείμενα και με συμβατικές πηγές φωτός, η δύναμη αυτή είναι εξαιρετικά μικρή για να προκαλέσει κάποιο μετρήσιμο αποτέλεσμα. Σε μικροσκοπικά σωματίδια, όμως, με μία ισχυρά εστιασμένη δέσμη laser, η δύναμη αυτή μπορεί να έχει αξιοσημείωτα αποτελέσματα (Brown and Brown 2001).

Με τις οπτικές λαβίδες εκτός από ουδέτερα σωματίδια, μπορούν επίσης να παγιδευτούν βιολογικοί οργανισμοί, όπως κύτταρα, ιοί και βακτήρια (Ashkin and Dziedzic 1987; Ashkin et al. 1987). Για πρώτη φορά παρατηρήθηκε το βήμα μεμονωμένων μορίων κινεσίνης (Svoboda et al. 1993) και αργότερα παρουσιάστηκαν οι πρώτες καμπύλες δύναμης σε συνάρτηση με την έκταση δίκλωνων μορίων DNA (dsDNA) (Smith, S. B. et al. 1996). Με τις οπτικές λαβίδες μπορούν να μετρηθούν δυνάμεις στην κλίμακα των pN, πράγμα αδύνατο με τη χρήση συμβατικών τεχνικών.

Η τεχνική των οπτικών λαβίδων, έχει μεγάλες δυνατότητες, ιδιαίτερα στο χειρισμό μεμονωμένων βιομορίων (Yin et al. 1995; Oddershede et al. 2002; Cecconi et al. 2005) και αποτελεί ένα από τα πιο μοντέρνα εργαλεία του σύγχρονου επιστήμονα.

Αλέξανδρος Κατρανίδης
Διδάκτωρ του N&N

“FRET: ΕΝΑΣ ΜΟΡΙΑΚΟΣ ΧΑΡΑΚΑΣ ΣΤΑ ΧΕΡΙΑ ΜΑΣ”

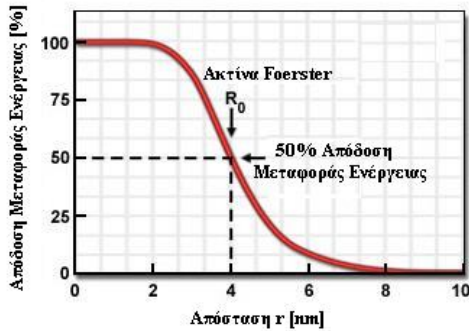
Το 1946, ο Theodor Förster δημοσίευσε ένα άρθρο στο *Naturwissenschaften* περιγράφοντας την κβαντομηχανική συμπεριφορά της μεταφοράς ενέργειας ηλεκτρονικής διέγερσης μεταξύ δύο μορίων σε διάλυμα.

Το φαινόμενο αυτό της μεταφοράς ενέργειας λόγω συντονισμού, το οποίο πήρε το όνομά του και εν συ-

ντομία ονομάζεται FRET (Förster Resonance Energy Transfer), χρησιμεύει ως μοριακός χάρακας για να μετρήσει ενδομοριακές αποστάσεις και αλλαγές στην διαμόρφωση μεμονωμένων βιομορίων.

Το FRET είναι ένα φαινόμενο, κατά το οποίο λαμβάνει χώρα μεταφορά ενέργειας από ένα φθορισμοφόρο με διηγευμένη ηλεκτρονική κατάσταση (δότης) σε

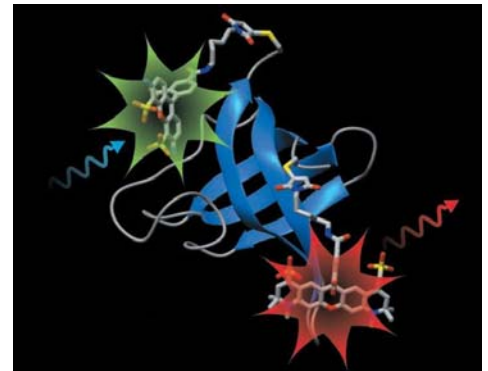
ένα κοντινό δεύτερο φθορισμοφόρο (δέκτης), χωρίς όμως εκπομπή ακτινοβολίας (φωτονίου). Η μεταφορά ενέργειας μπορεί να λάβει χώρα σε ένα εύρος 10-100 Å και η απόδοση της μεταφοράς είναι εξαιρετικά ευαίσθητη ως προς την απόσταση μεταξύ των φθορισμοφόρων.



Σχήμα 1: Απόδοση της μεταφοράς ενέργειας συναρτήσει της απόστασης μεταξύ ενός κατάλληλου ζεύγους φθορισμοφόρων

Το FRET χρησιμοποιείται στις χημικές επιστήμες, κυρίως στους σπινθηριστές και στους χημικούς αισθητήρες. Στη χημεία πολυμερών χρησιμοποιείται μεταξύ άλλων για να εξετάσει την αλληλοδιείσδυση των πολυμερικών αλυσίδων, το διαχωρισμό των φάσεων και την συμβατότητα μεταξύ των πολυμερών. Σε υπερμοριακά συστήματα χρησιμοποιείται στις μοριακές μηχανές και την τεχνητή φωτοσύνθεση. Το FRET έχει επίσης πολυάριθμες εφαρμογές στις βιολογικές επιστήμες. Μπορεί να μετρήσει in vivo αλληλεπιδράσεις μεταξύ πρωτεϊνών, την κινητι-

κή της αναδίπλωσης πρωτεϊνών, πιθανή ανταλλαγή πρωτεϊνικών υπομονάδων και ενζυματική ενεργότητα. Επιπρόσθετα μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μελέτη της πρωτοταγούς και δευτεροταγούς δομής κομματιών DNA, πιθανή ανταλλαγή γονιδίων μεταξύ δύο χρωμοσωμάτων, ανίχνευση υβριδισμού μεταξύ συμπληρωματικών αλληλουχιών νουκλεϊνικών οξέων, πιθανές αλληλεπιδράσεις του DNA με φάρμακα, ανίχνευση τριπλής έλικας DNA και αλληλεπιδράσεις μεταξύ DNA-πρωτεϊνών. Είναι ξεκάθαρο, λοιπόν, ότι το φαινόμενο του FRET έχει ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών σε πολλούς τομείς της επιστήμης.



Σχήμα 2: Μεταφορά ενέργειας μεταξύ δότη (πράσινο) και δέκτη (κόκκινο) όταν η πρωτεΐνη αναδιπλώνεται και τα δύο φθορισμοφόρα πλησιάζουν μεταξύ τους.

Αλέξανδρος Κατρανίδης
Διδάκτωρ του N&N

3. ΣΥΝΕΝΤΕΥΞΗ ΜΕ ΤΟΝ ΠΡΟΕΔΡΟ ΤΟΥ ΕΘΝΙΚΟΥ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΕΡΕΥΝΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗ Κ. Δ. ΚΥΡΙΑΚΙΔΗ

“το κράτος είναι ανάγκη να εντοπίσει τους στόχους του, ώστε η Ελλάδα να γίνει μια χώρα ανταγωνιστική στην έρευνα”

Ο κ. Δημήτριος Κυριακίδης, Καθηγητής Βιοχημείας στο Τμήμα Χημείας του ΑΠΘ, Πρόεδρος του Εθνικού Ιδρύματος Ερευνών και διδάσκων στο Διατμηματικό Μεταπτυχιακό Πρόγραμμα Σπουδών “Νανοεπιστήμες & Νανοτεχνολογίες” παρέθεσε για το Newsletter την παρακάτω συνέντευξη.



1. Στο Μεταπτυχιακό “Νανοεπιστήμες & Νανοτεχνολογίες” (N&N) ποια είναι τα μαθήματα που διδάσκετε;

Στο αντικείμενο του N&N υπάγονται και οι σημαντικοί κλάδοι της Νανοβιολογίας και Νανοβιοτεχνολογίας. Τα μαθήματα τα οποία διδάσκω λοιπόν, είναι η Βιοχημεία και η Βιοτεχνολογία. Στη Βιοχημεία θέλουμε οι φοιτητές μας να μάθουν για την προέλευση της ζωής, τη λειτουργία, το μεταβολισμό και τις δομές του κυττάρου. Αυτές οι γνώσεις συνδέονται με τη Νανοτεχνολογία, όταν, για παράδειγμα, κατά τον καταβολισμό (αποικοδόμηση) από πολύπλοκες κυτταρικές δομές καταλήγουμε στο επίπεδο της νανοκλίμακας, και αντίστροφα.

Στη Βιοτεχνολογία γίνεται αξιοποίηση γνώσεων της μοριακής βιολογίας, όπου με την επίδρασή μας στο γονιδίωμα προκύπτουν ωφέλιμες για εμάς εφαρμογές. Έτσι, με την κατευθυνόμενη σύνθεση νέων γονιδιακών πληροφοριών, αυτές είναι δυνατόν να οδηγήσουν σε καινούργια προϊόντα υψηλής προστιθέμενης αξίας, όταν βιομηχανικές μονάδες αναλάβουν

να τα χρησιμοποιήσουν παράγοντάς τα σε μεγάλη κλίμακα.

2. Ποια είναι η εικόνα που έχετε για τους φοιτητές του Μεταπτυχιακού; Οι μέχρι τώρα απόφοιτοι τι απορρόφηση είχανε ή προβλέπετε να έχουν στον εργασιακό χώρο;

Στο Μεταπτυχιακό κάνουν αίτηση περίπου 60 άτομα κάθε χρόνο. Από αυτά, μετά από συνέντευξη, επιλέγονται ~23, κι έχω παρατηρήσει πως διακρίνονται από ιδιαίτερη επιθυμία να συμβάλλουν σ’ αυτή τη νέα επιστήμη. Η απόδοσή τους κατά τη διάρκεια του Μεταπτυχιακού είναι πολύ ικανοποιητική. Δυστυχώς όμως, έχει παρατηρηθεί έντονα πως σε περιόδους καταλήψεων τα παιδιά χάνουν τον προσανατολισμό τους.

Οι φοιτητές του “N&N” είναι πολύ αξιόλογοι και οι διδάσκοντες διακατέχονται από κέφι ώστε να τους μεταδώσουν όσες περισσότερες γνώσεις γίνεται. Οι φοιτητές δουλεύουν στα εργαστήρια και κάνουν τη διπλωματική τους, έτσι αποκτούν απαραίτητη τεχνολογία και υψηλή κατάρτιση στο αντικείμενο. Με το διδακτορικό τους έχουν την ευκαιρία να δημοσιεύ-

σουν εργασίες σε περιοδικά και αυτό συμβάλλει στη μετέπειτα ανεύρεση θέσεων εργασίας. Οι πιθανότητες να βρουν μια πιο εξειδικευμένη δουλειά είναι πολύ περισσότερες μετά το “N&N”. Οι απόφοιτοί μας απορροφούνται κυρίως από βιομηχανίες και εταιρίες. Μάλιστα, πρόσφατα, ο πρώτος διδάκτορας του N&N, κ. Χ. Παπανεοφύτου, μόλις τελείωσε το διδακτορικό του, σε δυο μήνες ξεκίνησε να δουλεύει σε μια πολύ αξιόλογη εταιρεία.

3. Το Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών (ΕΙΕ) ποιους μπορεί να απασχολήσει;

Το ΕΙΕ είναι ανοιχτό σε προπτυχιακούς φοιτητές, όπου μπορούν να κάνουν τη διπλωματική τους εργασία, αλλά και σε φοιτητές για τη Μεταπτυχιακή ή τη Διδακτορική τους Διατριβή.

Οι ομάδες εργασίας στο ΕΙΕ κάνουν πολύ καλή δουλειά, κάτι που είναι πλέον διεθνώς γνωστό. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα στο Ίδρυμά μας να προσελκύονται ερευνητές από χώρες του εξωτερικού, κυρίως από την Αγγλία, τη Γαλλία και τις Βαλκανικές Χώρες, και να μειώνεται η ανάγκη των Ελλήνων να στρέφονται ερευνητικά εκτός Ελλάδας. Αυτή την περίοδο, συγκεκριμένα, φιλοξενούμε 60 ξένους φοιτητές.

4. Τι είδους είναι οι υποτροφίες που δίνονται σε ερευνητές στο ΕΙΕ και ποια είναι η οικονομική συνεισφορά του ελληνικού κράτους;

Από τα 600 άτομα που εργάζονται στο κέντρο τα 230 καλύπτονται μισθολογικά από τον τακτικό προϋπολογισμό ενώ οι υπόλοιποι από υποτροφίες και ερευνητικά προγράμματα.

Οι υποτροφίες αυτές παρέχονται από το ΙΚΥ (το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών), από την Ευρωπαϊκή Ένωση (υποτροφίες Marie Curie) και άλλες από ιδιωτικούς φορείς ή κοινωφελή Ιδρύματα.

Δυστυχώς, οι προκηρύξεις ερευνητικών προγραμμάτων από το ελληνικό κράτος είχαν ελαττωθεί τα τελευταία τρία χρόνια. Από φέτος η Ελλάδα έχει μπει

σε ένα νέο πρόγραμμα (ΕΣΠΑ) της Ε.Ε., όπου το 80% των χρημάτων για έρευνα θα έρχεται από την Ε.Ε. και το 20% από το ελληνικό κράτος. Συνεπώς, αναμένουμε τις προκηρύξεις πολλών ερευνητικών προγραμμάτων από τη Γενική Γραμματεία του Υπουργείου Ανάπτυξης τους επόμενους μήνες. Αυτή θα είναι μια πολύ ελπιδοφόρα κίνηση για την άνθηση των επιστημών στον ελληνικό χώρο, ώστε να γίνουμε κι εμείς ως χώρα περισσότερο ανταγωνιστική.

5. Ποια είναι η εικόνα του ΕΙΕ σε Ελλάδα και εξωτερικό;

Το 2005 έγινε αξιολόγηση από μια Διεθνή Επιτροπή Επιστημόνων και το ΕΙΕ έλαβε τρεις αριστείες και τρία “λίαν καλώς”. Το ΕΙΕ απαρτίζεται από έξι Ινστιτούτα, εκ των οποίων τρία είναι θετικών επιστημών (Ινστιτούτο Βιολογικών Ερευνών και Βιοτεχνολογίας - ΙΒΕΒ, Ινστιτούτο Θεωρητικής Φυσικής Χημείας - ΙΘΦΧ και Ινστιτούτο Οργανικής Φαρμακευτικής Χημείας - ΙΟΦΧ) και είναι ιδιαίτερα ανταγωνιστικά, προσελκύουν μεγάλα ερευνητικά προγράμματα, υποτροφίες Marie Curie κι έχουν πολλές δημοσιεύσεις.



Ο Διευθυντής και Πρόεδρος του Ε.Ι.Ε. κ. Δημήτριος Κυριακίδης

Θεωρούμε όμως, ως Ίδρυμα, πολύ σημαντικό η έρευνα να μην παραμένει μόνο στα επιστημονικά πε-

ριοδικά, αλλά να διαδίδεται έμπρακτα και στην κοινωνία. Αυτό γίνεται μέσα από τη δράση “Επιστήμη και Κοινωνία”, όπου δυο με τρεις φορές την εβδομάδα δίνονται καθιερωμένες ομιλίες, ανοιχτές στο κοινό, με εκλαϊκευμένα θέματα από προσκεκλημένους ομιλητές και από τους ερευνητές του ΕΙΕ. Με τον τρόπο αυτό, γνωστοποιείται η πορεία της έρευνας στην Ελλάδα, τα επιτεύγματά μας, καθώς γίνεται συζήτηση και ενημέρωση για πολλά θέματα που αφορούν όλη την κοινωνία. Για παράδειγμα την προηγούμενη εβδομάδα συζητήθηκε το θέμα: “Φάρμακα: χρήση και κατάχρηση”.

Είναι μια σημαντική διαδικασία αλληλεπίδρασης με την κοινωνία. Συνειδητοποιεί, έτσι, το ελληνικό κοινό πως ό,τι προσφέρει για την έρευνα τού ανταποδίδεται. Μάλιστα, είναι πολύ εντυπωσιακό το ιδιαίτερο ενδιαφέρον που επιδεικνύουν γι’ αυτού του είδους τις ομιλίες τα νεαρά άτομα. Οι ομιλίες αυτές βρίσκονται στο Διαδίκτυο και σε βιβλία, τα οποία είναι δυνατόν να προμηθευτεί όποιος ενδιαφέρεται σε πολύ προσιτές τιμές. Πρόσφατα και για ένα μήνα αποτέλεσε αντικείμενο ομιλιών ο “Δαρβινισμός”. Το εντυπωσιακό είναι πως μετά το πέρας των ομιλιών, οι συζητήσεις του κοινού συνεχίζονται στο Διαδίκτυο, ακόμη και σήμερα, και αυτή η επικοινωνία μας χαροποιεί ιδιαίτερα.

6. Ποια είναι η σχέση του ΕΙΕ με τα Πανεπιστήμια και τα υπόλοιπα Ερευνητικά Κέντρα;

Η σχέση του ΕΙΕ με τα Πανεπιστημιακά Ιδρύματα και τα ερευνητικά κέντρα είναι πολύ καλή. Το ΕΙΕ είναι ανοιχτό στη συνεργασία με αυτά σε οποιαδήποτε ευκαιρία, άλλωστε και λόγω γεωγραφικής θέσης προσφέρει τους χώρους του σε φορείς και έχει μετατραπεί σε κόμβο ερευνητικών δραστηριοτήτων. Το ίδιο ισχύει και με τα Πανεπιστήμια κι ερευνητικά κέντρα του εξωτερικού. Πέρυσι, ήταν προσκεκλημένοι ομιλητές του ΕΙΕ δυο νομπελίστες, ο Jean-Marie Lehn (Νόμπελ Χημείας 1987) και ο Edmond H. Fischer (Νόμπελ Φυσιολογίας-Ιατρικής 1992) και

υπήρξε ιδιαίτερη αλληλεπίδραση κατά την επίσκεψή τους με τους φοιτητές, κάτι που θα επαναληφθεί και φέτος.

7. Σκέφτεστε το ενδεχόμενο της επέκτασης του ΕΙΕ;

Υπάρχει η επιθυμία να δημιουργηθούν παραρτήματα κι εκτός Αθηνών, αλλά και να επεκταθεί το ήδη υπάρχον κτίριο. Η πιο άμεση βλέψη είναι για τη Θεσσαλονίκη. Ήδη έχει προσφερθεί από τη Νομαρχία Θεσσαλονίκης ένα κτίριο ώστε να γίνει αυτό το άνοιγμα. Την επέκταση αυτή του ΕΙΕ την φανταζόμαστε όχι μόνο χωροταξική αλλά κυρίως ως επέκταση της έρευνας, γενικότερα, στην Ελλάδα. Η κίνηση αυτή θυμίζει το γερμανικό μοντέλο, όπου Ερευνητικά Ινστιτούτα αναπτύσσονται γύρω από κάθε Πανεπιστήμιο σε τέτοιο βαθμό ώστε η Γερμανία να έχει διπλάσιο αριθμό Ερευνητικών Κέντρων απ’ ό,τι Πανεπιστήμια.

8. Έχετε δηλώσει τη διάθεση για εκσυγχρονισμό των εσωτερικών δομών του ΕΙΕ. Τι εννοείτε με αυτό;

Υπάρχει νόμος που καθορίζει τον εσωτερικό κανονισμό των ιδρυμάτων, όμως δεν εξειδικεύεται σε κάθε ίδρυμα. Το ΕΙΕ είναι ένας οργανισμός ιδιωτικού δικαίου. Δηλαδή, επιχορηγείται από το κράτος μόνο για τη μισθοδοσία των μόνιμων υπαλλήλων. Επομένως, το ΕΙΕ από μόνο του μπορεί να καθορίσει τις δικλίδες ασφαλείας του (διασφάλιση οικονομικών, εργασιακά προνόμια, εργασιακή ισορροπία), ώστε να είναι προς όφελος της προόδου του. Με γνώμονα τους υπάρχοντες νόμους, γίνεται προσπάθεια ώστε η εργασία των ερευνητών να είναι πιο ευέλικτη. Για παράδειγμα, στοχεύουμε στο να περιοριστούν οι γραφειοκρατικές διαδικασίες, να υπάρχει πιο μεγάλη οργάνωση, ώστε ο συντονισμός από τον εκάστοτε Πρόεδρο να είναι πιο γρήγορος και αποδοτικός. Ήδη έχει γίνει εκσυγχρονισμός στις δομές του ΕΙΕ και με αυτό εννοώ τη βελτίωση του Καταστατικού

Χάρτη του Ερευνητή (κείμενο της Ε.Ε. που ασπάζονται οι κυβερνήσεις), δηλαδή των υποχρεώσεων της εκάστοτε κυβέρνησης απέναντί στον ερευνητή, όπως το να έχει τον ίδιο μισθό σε κάθε χώρα, περιθαλψη και διευκόλυνση στη διαβίωση τόσο του ίδιου όσο και της οικογένειάς του.

9. Έχει αναφερθεί πως στις ερευνητικές δραστηριότητες του ΕΙΕ διεξάγονται διεργασίες φιλικές προς το περιβάλλον για την παραγωγή προϊόντων για την ελληνική βιομηχανία. Πόσο εύκολο είναι αυτό;

Αυτό γίνεται, όντως, διότι και οι βιομηχανίες αυτό ζητούν. Θέλουν προϊόντα με χαμηλό κόστος αλλά όχι βλαβερά προς το περιβάλλον. Το ΕΙΕ συνεργάζεται με ελληνικές και ξένες βιομηχανίες (τροφίμων, φαρμάκων, χημικές βιομηχανίες κ.α.).

10. Πώς προάγεται η Νανοτεχνολογία στο ΕΙΕ και πώς βλέπετε την πορεία της στον ελλαδικό χώρο;

Στο ΕΙΕ η ερευνητική ομάδα που ασχολείται με τη Νανοτεχνολογία είναι αξιόλογη αλλά ο αριθμός των ερευνητών της είναι περιορισμένος. Πιο συγκεκριμένα, οι ερευνητές στο ΙΘΦΧ φτιάχνουν υλικά, και σε συνεργασία με βιολόγους συνδέουν σε αυτά παράγοντες που τα κάνουν βιολογικώς ενεργά. Ενεργοποιείται η επιφάνεια των υλικών αυτών ώστε τα νανοσωματίδια που προκύπτουν να μπορούν να μεταφέρουν σε κύτταρα φάρμακα (drug delivery) ή να καταστρέφουν καρκινικά κύτταρα. Η Νανοβιοτεχνολογία έχει κάνει σημαντική πρόοδο τα τε-

λευταία 10 χρόνια με τη μίμηση των βιολογικών συστημάτων (μοριακές μηχανές ή αισθητήρες).

Το παράπονό μου για την έρευνα στη Νανοβιοτεχνολογία στην Ελλάδα είναι πως παραμένει αρκετά περιορισμένη, σε λίγες ερευνητικές ομάδες. Η Νανοβιοτεχνολογία είναι ένας διεπιστημονικός τομέας στον οποίο η Ελλάδα θα μπορούσε να είναι ανταγωνιστική, διότι στη Φυσική, τη Χημεία και τη Βιολογία έχει προχωρήσει πολύ τα τελευταία χρόνια. Χρειάζεται να υπάρξει συντονισμός κινήσεων σε αυτόν τον τομέα. Χρειάζεται να ιδρυθεί ένας κρατικός οργανισμός που θα είναι υπεύθυνος για την πορεία των Νανοεπιτημών για τα επόμενα 10-20 χρόνια, υπό την αιγίδα του Υπουργείου Ανάπτυξης.

Χρειάζεται να δίνει κατευθύνσεις και πόρους, ώστε να αναπτυχθεί η έρευνα, με νέα ευρήματα, τα οποία θα χρησιμοποιηθούν από βιομηχανίες. Η χώρα μας είναι ανάγκη να οργανωθεί, να εντοπίσει τους στόχους της, χωρίς την απαίτηση να πρωτοτυπήσει, αλλά τουλάχιστον να ακολουθήσει παραδείγματα άλλων ανταγωνιστικών χωρών. Θα μπορούσε, όπως γίνεται και σε άλλες χώρες, να ορισθεί μια ομάδα εξειδικευμένων ανθρώπων στον τομέα της Έρευνας και της Νανοτεχνολογίας, οι οποίοι να προτείνουν κατάλληλες οδούς για την πορεία και την ανάπτυξη της έρευνας σε αυτό τον τομέα αιχμής. Εμπνευσμένοι και με όρεξη επιστήμονες υπάρχουν και μπορούν να βοηθήσουν προς την κατεύθυνση αυτή. Περιμένουμε την Πολιτεία.

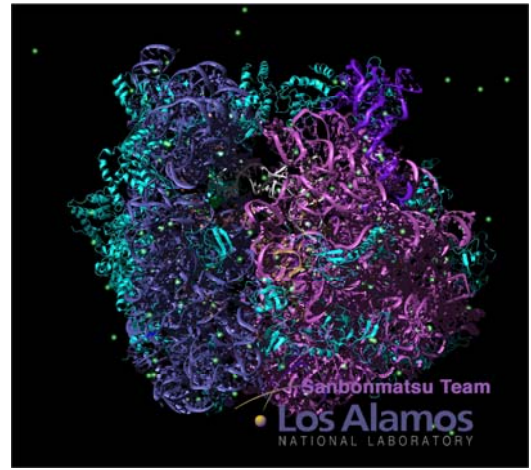
Φ.Λ.

4. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΚΑΙ ΕΡΓΑΛΕΙΑ ΣΤΗ ΝΑΝΟΚΛΙΜΑΚΑ

Η χρήση των υπολογιστών για τη μοντελοποίηση συστημάτων και την προσομοίωση φαινομένων, αποτελεί αναπόσπαστο κομμάτι της έρευνας για πολλές επιστήμες (φυσική, βιολογία, μαθηματικά, ιατρική κ.α.). Αυτό οφείλεται στην ανάπτυξη και εφαρμογή μεγάλου αριθμού υπολογιστικών μεθόδων που επιτρέπουν τη μελέτη συστημάτων σε πολλαπλές κλίμακες. Τίθεται λοιπόν το ερώτημα, μπορούν κάποιες από αυτές να αποδειχθούν εξίσου επιτυχημένες σε ένα ραγδαία εξελισσόμενο τομέα, όπως η Νανοτεχνολογία;

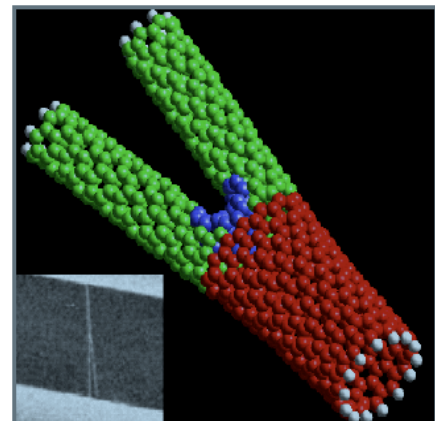
Η ελαχιστοποίηση του μεγέθους των διατάξεων της Νανοτεχνολογίας που προβλέπεται να προσεγγίσει το ατομικό επίπεδο, απαιτεί τη χρήση νέων προσεγγίσεων στα πλαίσια των σχετικών υπολογιστικών μελετών. Μία τέτοια προσέγγιση είναι και η χρήση των υπολογιστικών μεθόδων οι οποίες αποτελούν ένα μοναδικό εργαλείο για την ερμηνεία και την κατανόηση των φαινομένων στη νανοκλίμακα όπου και εμφανίζονται νέες και συχνά μη αναμενόμενες ιδιότητες (π.χ. οι νανοσωλήνες άνθρακα ανάλογα με τη δομή τους εμφανίζουν μεταλλική ή ημί-αγώγιμη συμπεριφορά).

Οι υπολογιστικές μέθοδοι μάς επιτρέπουν την πρόβλεψη ιδιοτήτων υλικών και νανοσυστημάτων. Έτσι, αποκλείουν εκείνα τα οποία εμφανίζουν ατέλειες ή δεν είναι κατάλληλα για τη ζητούμενη εφαρμογή, χωρίς να χρειαστεί να εμπλακούμε σε χρονοβόρες πειραματικές τεχνικές. Ταυτόχρονα, το κόστος της χρήσης των υπολογιστικών μεθόδων είναι σαφώς μικρότερο από αυτό του πειράματος, ενώ οι πληροφορίες που προκύπτουν από την προσομοίωση ενός συστήματος είναι περισσότερες (π.χ. κατά την κίνηση μίας πρωτεΐνης μπορούμε να γνωρίζουμε τη θέση των ατόμων σε κάθε χρονική στιγμή).



Σχήμα 1. Ριβόσωμα, μία από τις μεγαλύτερες δομές (2.64 εκατομμύρια άτομα) που έχει μοντελοποιηθεί και προσομοιαστεί στη νανοκλίμακα.

Οι κυρίαρχες υπολογιστικές μέθοδοι στη νανοκλίμακα είναι οι μέθοδοι μοριακής δυναμικής (molecular dynamics) που χρησιμοποιούν εμπειρικά πεδία δυνάμεων για την περιγραφή των δυνάμεων μεταξύ των ατόμων και οι υπολογισμοί από πρώτες αρχές (ab initio, first principles) που βασίζονται στη λύση των εξισώσεων της κβαντομηχανικής θεωρίας. Οι υπολογισμοί από πρώτες αρχές, εξαιτίας της αναλυτικότητάς, τους περιορίζονται στην περιγραφή συστημάτων αποτελούμενων από μικρό αριθμό ατόμων. Επιπλέον, χρησιμοποιούνται και άλλες μέθοδοι, όπως η Monte Carlo, που επιτρέπουν τη μοντελοποίηση γρήγορων διαδικασιών μέσω στοχαστικών αλγορίθμων (π.χ. Metropolis), αλλά και μέθοδοι συνεχούς μηχανικής για την περιγραφή των μηχανικών ιδιοτήτων νανοδομών.



Σχήμα 2. Δομή επαφής τύπου Υ νανοσωλήνα άνθρακα που αρχικά προβλέφθηκε από υπολογιστικές μεθόδους και αργότερα επιβεβαιώθηκε πειραματικά ^[1].

Μία ακόμα σημαντική συνεισφορά στην ανάπτυξη των Νανοεπιστημών έρχεται μέσω της συσχέτισης των υπολογιστικών αποτελεσμάτων που προκύπτουν με πειραματικά αποτελέσματα. Έτσι, επιτυγχάνεται η ανάλυση και η ερμηνεία των μηχανισμών που διέπουν τα υπό μελέτη φαινόμενα στην νανοκλίμακα. Αποτέλεσμα του γεγονότος αυτού είναι να οδηγούμαστε στη βαθύτερη κατανόηση του υπό μελέτη φαινομένου, στην ακριβή μοντελοποίηση των πειραματικών δεδομένων, και ενδεχομένως σε προτάσεις για το σχεδιασμό νέων πειραμάτων έχοντας ήδη το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο. Ένα παράδειγμα αφορά τη δομή επαφής τύπου Y νανοσωλήνα άνθρακα (Σχήμα 2) που προβλέφθηκε υπολογιστικά σε δύο δημοσιεύσεις από τους Menon et al. το 1997 και 1998^[3-4] με μέθοδο μοριακής δυναμικής, και αναπτύχθηκε το 2002 από τους Terrones et al.^[5]

Ένα ακόμα παράδειγμα της χρήσης υπολογιστικών μεθόδων για την ανάπτυξη εφαρμογών της Νανοτεχνολογίας είναι η μελέτη από τους Lopez και Norskov^[6] της καταλυτικής οξειδωσης του μονοξειδίου του άνθρακα (CO) από νανοσωματίδια χρυσού. Χρησιμοποιώντας τη θεωρία του συναρτησιοειδούς της πυκνότητας (Density Functional Theory) η οποία ανήκει στις μεθόδους υπολογισμών από πρώτες αρχές, έδειξαν ότι ένα νανοσωματίδιο χρυσού μπορεί να δράσει καταλυτικά στην οξειδωση του CO ακόμα και σε θερμοκρασία μικρότερη από τη θερμοκρασία δωματίου. Επίσης, χρησιμοποίησαν τα αποτελέσματα των υπολογισμών για να δείξουν ότι η έντονη δραστηκότητα των νανοσωματιδίων χρυσού (ενώ ο χρυσός είναι αδρανής) οφείλεται στη νανοδομή των νανοσωματιδίων. Ένα ακόμα παράδειγμα εφαρμογής υπολογιστικών μεθόδων στη νανοκλίμακα και πιο συγκεκριμένα στον κλάδο των μοριακών ηλεκτρονικών (molecular electronics) είναι η μελέτη των Ventra et al. το 2000,^[7] στην οποία χρησιμοποιώντας υπολογισμούς από πρώτες αρχές ερμηνεύονται μερικώς κάποια από τα φαινόμενα που παρατηρήθηκαν στην πειραματική εργασία των Reed et al.^[8]

Συμπερασματικά, το μέλλον της υπολογιστικής Νανοτεχνολογίας είναι λαμπρό και θα επηρεάσει άμεσα τις εξελίξεις στον κλάδο των Νανοεπιστημών. Η μοντελοποίηση και οι προσομοιώσεις των συστημάτων στη νανοκλίμακα, όχι μόνο θα συνεισφέρουν στην ανάπτυξη, αλλά θα αναδείξουν νέες επαναστατικές καινοτομίες σε πολλά καίρια σημεία των Νανοεπιστημών. Οι πρωτότυπες εφαρμογές νέων υλικών, η εξέλιξη της νάνο-ηλεκτρονικής, οι βίο-αισθητήρες, η βιοπληροφορική, η ελεγχόμενη μεταφορά των φαρμάκων (drug delivery) είναι μόνο κάποιες από τις τεχνολογικές εφαρμογές στις οποίες ήδη έχει σημειωθεί σημαντική πρόοδος με την βοήθεια της εφαρμογής υπολογιστικής Νανοτεχνολογίας.

Αναφορές

- [1] Srivastava D., Satya N. Atluri Computational Nanotechnology: A Current Perspective, CMES, vol.3, no.5, pp.531-538, (2002).
- [2] R C Merkle, Computational nanotechnology, NANOTECHNOLOGY, Volume 2, Number 3, pp. 134-141 (1991).
- [3] Menon M.; Srivastava D., Carbon Nanotube T-junctions: Nanoscale Metal-Semiconductor-Metal Contact Devices, Phys. Rev. Lett. Vol. 79, 4453-4456, (1997).
- [4] Menon M.; Srivastava D. : Carbon Nanotube based Molecular Electronic Devices, J. Mat. Research, Vol. 13, 2357, (1998).
- [5] Terrones et al., Molecular Junctions by Joining Single-Walled Carbon Nanotubes, Phys. Rev. Lett. 89, 075505. (2002).
- [6] N Lopez and, J K. Norskov, Catalytic CO Oxidation by a Gold Nanoparticle: A Density Functional Study, J. Amer. Chemical Soc. 124 (38), 11262-11263, (2002).
- [7] Ventra M Di, S.T. Pantelides, N.D. Lang, First-Principles Calculation of Transport Properties of a Molecular Device, Phys. Rev. Lett. 84, 979 - 982, (2000).
- [8] M. A. Reed, C. Zhou, C. J. Muller, T. P. Burgin, and J. M. Tour, Science 278, 252 (1997).

Γιώργος Βολωνάκης
Υποψήφιος Διδάκτωρ N&N