

КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

Проанализированы различные подходы к созданию молекулярных сенсорных устройств. Рассмотрены принципы работы сенсорных устройств с использованием молекулярной элементной базы и особенности технологической реализации исследуемых в данной работе устройств.

© Н.И. Ходаковский, 2003

УДК 681.3

Н.И. ХОДАКОВСКИЙ

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВ

Изучение свойств отдельных компонентов и принципов функционирования последних на молекулярном уровне позволили во многом получить определенные результаты по созданию молекулярной элементной базы для построения отдельных устройств обработки информации, способных в дальнейшем быть востребованными для разработок перспективной вычислительной техники. Изучение технологических приемов по получению материалов, близких по характеристикам к молекулярным структурам, использующих принципы обработки информации за счет конфигурационных превращений, во многом позволили понять механизм работы указанных молекулярных структур по обработке информации в составе надмолекулярных образований.

Прототипом базовых элементов при разработке молекулярных вычислительных устройств может быть молекулярное сенсорное устройство (МСУ), представляющее собой структуру, состоящую из детектирующего слоя и преобразователя, способного формировать электрический или оптический сигнал при изменении свойств детектирующего слоя. В качестве детектирующего слоя может быть использована ферментная пептидная структура или молекулярная пигментная структура, которые образуют своеобразную молекулярную матрицу. Входящие в состав МСУ молекулы способны выполнять вычислительные операции путем взаимодействия и последующего преобразования в другую форму молекул вещества, с помощью которо-

го формируется и передается сигнал.

Поскольку выходной сигнал имеет информацию о происходящих процессах в молекулярном носителе сигнала, то в результате обработки последнего, можно определять не только химический состав указанного носителя, но и иметь данные о его функциональной активности. Ряд исследователей считают, что на первом этапе создания молекулярных электронных устройств будут создаваться гибридные приборы в виде твердотельных МСУ на основе полупроводниковых структур [1-3], как это случилось в случае изготовления нейрокомпьютеров на базе нейрочипов [4].

Применение групповой технологии изготовления интегральных схем с использованием монокристаллического кремния, которая, кроме значительного снижения стоимости создаваемого прибора, позволяет достигать необходимый уровень интеграции и совмещения на одном кристалле специализированных вычислительных и детектирующих приборов. При этом указанные приборы могут функционировать с буферной электронной схемой для записи и обработки необходимой информации.

Требования к разрабатываемой молекулярной матрице заключаются в необходимости создания в последней определенной структурно функциональной организации, позволяющей идентифицировать границы раздела, а также определять уровень активности областей возмущения, вызванных заданным характером внешних возмущающих факторов. При формировании выходного сигнала с помощью молекулярной матрицы можно выделить три этапа. На первом этапе происходит специфическое распознавание поступившего сигнала, на втором – адекватная реакция структуры матрицы с соответствующим изменением физических и химических свойств последней. На третьем – мы можем получить соответствующий выходной сигнал, несущий информацию об уже измененной структуре рассматриваемой матрицы.

Необходимо отметить, что, в отличие от традиционных ЭВМ, молекулярные устройства обладают специфическим механизмом распознавания характера изменений в молекулярной структуре в результате воздействия внешних факторов. Например, группы молекул в составе молекулярных матриц используют своеобразную пространственную логику, которая заключается в определении места расположения и последующего точного фиксирования измененных фрагментов молекулярных группировок. Другими словами, можно сказать, что в молекулярных структурах нет жесткой программы поддержания формы своей структуры, но существует не менее четкий механизм учета и регулирования пределов возможного изменения расположения одних молекулярных фрагментов относительно других.

Высокая чувствительность молекулярных структур – один из важных факторов, позволяющих использовать последние в виде молекулярных датчиков. Механизм запуска своеобразной цепи молекулярного усиления обеспечивается за счет воздействия входного сигнала, который включает механизм срабатыва-

ния цепи химических реакций, позволяющих получить в определенной области МСУ резкое увеличение соответствующего продукта.

Приведенный механизм запуска цепи молекулярного усиления может также осуществляться за счет включения переходных процессов в мембранных комплексах клеток, которые могут запускаться посредством регулирования проницаемости ионных каналов и последующего изменения уровня трансмембранного потенциала. Запускающим фактором, вышеуказанных химических реакций, может являться феномен значительного уменьшения уровня специализированных молекулярных структур в виде липосом, что вызывает появление в клеточной среде большого количества молекулярных меток.

Значительная избирательность молекулярных ферментных структур сильно зависит от определенных внешних факторов:

- присутствие определенного специфического компонента для протекания реакций;
- наличие узкого температурного диапазона;
- определенного значения ионной силы растворов в клеточных структурах;
- точного узкого интервала кислотности среды;
- необходимость наличия ингибиторов химических реакций в качестве ионов тяжелых металлов.

Способность молекулярных структур преобразовывать сигналы, полученные при оценивании параметров расположения одних молекулярных фрагментов относительно других, т.е. специальных сигналов формы, позволяет молекулярным сенсорным устройствам производить прием различных сигналов из окружающей среды за счет использования в МСУ переключаемых структур [5,6]. Указанные переключаемые структуры могут выполнять свои функции, как на уровне молекулярных агрегатов, так и на уровне отдельных молекул, когда специальный элемент молекулы – своеобразная антенна после приема сигнала, передает последний на участок молекулы, ответственный за дальнейшую обработку сигнала.

Например, световой сигнал может поступать на молекулярную антенну, содержащуюся в клеточных структурах органов зрения, представляющую собой молекулярный пигмент – опсин, в состав которого входит хромофорная группа, позволяющая поглощать свет видимого диапазона. В другом зрительном пигменте – родопсине, осуществляется связь с хромофорной группой посредством молекулярных связей типа $C=N$.

При попадании порции света на хромофорную группу (ретиаль R), последняя претерпевает реакцию изомеризации путем перехода структуры из цис- в транс-форму. Полученная таким образом транс-форма хромофорной группы отсоединяется от основной молекулярной структуры родопсина, при этом последний претерпевает конформационное превращение, что сопровождается процессом транслокации и проявлением типичного фазового перехода. Таким образом, на этом этапе, мы уже имеем дело с другой структурой родопсина, находящегося в возбужденном состоянии и позволяющего запустить механизм цепи фер-

ментативных реакций, позволяющих изменять проницаемость ионных каналов мембранного комплекса клетки. Последний полученный эффект позволяет значительно повысить чувствительность ионных каналов к свету. При этом мы получаем уровень чувствительности, при котором, попадание на рассмотренную выше приемную часть молекулы 1 фотона, вызывает торможение до 250 ионных каналов в мембранном комплексе клетки органа зрения [7]. В свою очередь, процесс поглощения хромофорной группой фотона света, вызывает на мембране клетки возникновение волнового проявления трансмембранного потенциала.

Требования, предъявляемые к молекулярным сенсорным устройствам, предполагают, что определенная часть вычислительных процессов осуществляется непосредственно в самом МСУ на уровне решения задач распознавания образов [8]. МСУ должны уметь, кроме определения типа вещества в сложной многокомпонентной среде, находить соотношение концентраций веществ и их форму. В случае работы с источниками оптического излучения МСУ должен не только определять интенсивность излучения и длину волны, а и распознавать спектр, форму и пространственные координаты источника.

Базовым элементом для изготовления МСУ может быть использована матрица в виде двухслойной мембраны, которая содержит фоточувствительный пигмент в ячейках для регистрации приходящих сигналов, а краситель, реагирующий на величину электрического поля в ячейках для анализа обрабатываемой информации. При попадании порции света в виде фотона в ячейку с пигментом, происходит изменение дипольного момента и соответствующих конформационных изменений последнего. В результате суммарного действия по указанному механизму множества указанных ячеек, происходит формирование итогового сигнала.

Рассматривая эффективность работы вышеприведенных базовых элементов для вычислений в средах молекулярных структур, можно выделить ряд этапов по обработке информации с помощью процессов распознавания образов:

- получение микрокаркасов по методу получения двумерных пептидных структур для обеспечения выполнения этапов самосборки отдельных элементов МСУ;
- встраивание базового модуля в созданную вне клетки искусственную мембрану;
- использование МСУ для контроля параметров электрического поля вокруг модуля в полученной искусственной мембране;
- создание на основе базового модуля библиотеки специализированных модулей;
- массовое изготовление МСУ на основе применения рекомбинантных ДНК-структур.

Надежность работы в вышеуказанной системе будет зависеть от уровня процессов саморемонта и замены вышедших из строя компонентов, как это имеет место в системах обработки информации на основе живой клетки.

Перспективность разработок элементов МСУ может быть в значительной мере реализована за счет использования базовой технологии изготовления инте-

гральных схем с применением монокристаллического кремния. При работе с последним возможны значительные продвижения на пути создания трехмерных микроструктур посредством использования методов изотропного и анизотропного травления. Возможности анизотропного травления, при котором травление монокристалла осуществляется перпендикулярно определенной кристаллографической плоскости, позволяют получать субмикронные мембраны и конструкции с подвижными фрагментами [9]. Однако, необходимо подчеркнуть, что создание гибридных конструкций, состоящих из традиционных элементов интегральных полупроводниковых схем и элементов молекулярных матриц, требует глубокого изучения механизмов совместного функционирования последних в рамках одной квантовомеханической системы. Такие явления, как электростатическое и ван-дер-ваальсовое взаимодействия, а также процессы поверхностного натяжения, которые присущи при создании молекулярных матриц, необходимо учитывать и при разработках вышеуказанных гибридных МСУ.

1. *Стриха В.И., Шульга А.А.* Биосенсоры на основе полупроводниковых структур // *Вісн. АН УРСР.* – 1988. – №2. – С.21-33.
2. *Special issue on sensors and actuators* // *IEEE Trans. Electron Devices*, 1988. – Vol. 35. – №6. – 135 p.
3. *Joachim C., Gimzewski J.K.* An electromechanical amplifier using a single molecule // *Chem.Phys.Lett.*, 1997. – Vol. 265. – P. 353-357.
4. *Cuberes M.T., Schlittler R.R., Gimzewski J.K.* Room temperature supramolecular repositioning at molecular interfaces using scanning tunnelling microscope // *Surface Sci.Lett.*, 1997. – Vol. 371. – P. 231-234.
5. *Рамбиди Н.Г., Замалин В.М.* Молекулярная микроэлектроника: Физические предпосылки и возможные пути развития // *Поверхность. Физика, химия, механика.* – 1986. – № 8. – С. 5-30.
6. *Stieve H.* Sensors of biological organisms - biological transducers // *Sensors and Actuators.* - 1983. – Vol. 4. – P. 689-704.
7. *Рубин А.Б.* Биофизика. – М.: Высш. шк., 1987. – 2. – 303 с.
8. *Иваницкий Г.Р.* Биологические микроустройства // *Вестн. АН СССР*, 1984. – №3. – С.118-128.
9. *Ko W.H.* Solid-state physical transducer for biomedical research // *IEEE Trans.Bio-Med. Eng.* – 1986. – Vol. 33. – №2. – P.153 - 162.

Получено 01. 07. 2002