

УДК 621.82-022.532

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ МОЛЕКУЛЯРНОГО НАНОПОДШИПНИКА ДРЕКСЛЕРА – МЕРКЛЕ

*Д.А. Алишева, Д.С. Тарасов, Е.Д. Изотова, Н.И. Акберова*

### Аннотация

Конструкции функциональных механических наноустройств, таких, как подшипники, планетарные передачи, молекулярные наносы и другие были разработаны рядом авторов и исследованы методами молекулярной механики. Однако вопрос о химической стабильности подобных структур не был изучен достаточно полно. В данной работе впервые методами квантовой химии исследуется стабильность конструкции молекулярного подшипника Дрекслера – Меркле, являющегося простейшим, но типичным представителем класса алмазодных наномашин. Изучены возможные перестройки в структуре подшипника, приводящие к выходу его из строя. Установлено, что теоретическое время жизни подшипника при нормальной температуре ( $T = 298$  К) превышает  $10^{10}$  с.

**Ключевые слова:** наноустройства, наноподшипник, полуэмпирический метод АМ1, методы теории функционала плотности (DFT), молекулярная динамика.

### Введение

Создание функциональных наноразмерных устройств является одной из главных задач нанотехнологии, решение которой имеет потенциально революционное значение для развития компьютерной техники, медицины и других областей. Компоненты таких устройств должны проектироваться и конструироваться с точностью, допускающей спецификацию местоположения отдельных атомов.

Впервые возможность построения структур с точностью до атома была описана Нобелевским лауреатом Ричардом Фейнманом в 1959 г. [1]. Возможности, структуры и средства для конструирования механических молекулярных машин и молекулярных производственных систем на их основе теоретически исследованы в работах Э. Дрекслера начиная с 1981 года в статьях [2] и книге [3].

Части молекулярных машин, такие, как подшипник, планетарная передача и молекулярный насос, для перекачки неона были разработаны Э. Дрекслером и Р. Меркле с использованием методов молекулярной механики. Функционирование этих механизмов было позднее проверено путем моделирования молекулярной динамики в рамках проекта NASA Ames [4].

Последовавшая дискуссия о возможности создания подобных функциональных наномашин продолжается до настоящего момента. Некоторое время назад такая возможность, а следовательно, и польза от их изучения, отвергалась большинством исследователей. Однако в 2006 г. в отчете Национального исследовательского совета США [5] молекулярные машины были рассмотрены в разделе «Сайт-специфичная химия для крупномасштабного молекулярного производства». В отчете констатируется, что анализ потенциальных возможностей подобных систем на сегодняшний день является затруднительным и рекомендуется проведение дополнительных исследований. На основании этой рекомендации в «Технологическом

плане развития производственных наносистем», разработанном «Battelle Memorial Institute» [6], предложены направления для дальнейших исследований, в число которых включено моделирование механических наномашин.

Одним из нерешенных вопросов в данной области является проблема химической стабильности механических молекулярных машин. Хотя функционирование фрагментов молекулярных машин исследовалось с помощью методов молекулярной механики [4, 7], эти исследования ничего не говорят о том, что в процессе их работы не будут происходить химические перестройки, поэтому для изучения вопроса о стабильности молекулярных машин и возможности их синтеза необходимо использовать методы квантово-химических расчетов. Размер многих теоретически разработанных молекулярных машин превышает 3000 атомов, что делает практически невозможным их изучение методами квантовой химии. Тем не менее стабильность молекулярных машин может быть изучена на примере более простых представителей данного класса.

Цель данной работы – уточнение пространственной структуры и оценка стабильности молекулярного подшипника, который является одной из самых простых конструкций молекулярных машин, описанных Э. Дрекслером [3].

Подшипники представляют собой устройства, которые поддерживают какую-либо конструкцию, фиксируя ее положение в пространстве и обеспечивая этой конструкции вращение.

Исследуемый подшипник состоит из 206 атомов, его ось имеет вращательную симметрию шестого порядка, корпус – вращательную симметрию четырнадцатого порядка. Ось подшипника состоит из 2 симметричных частей, соединенных атомами О. Каждая из этих симметричных частей, в свою очередь, состоит из первого кольца из атомов С, соединенных с атомами Н, кольца из атомов С и S и второго кольца из атомов С, соединяющихся с атомами О (рис. 1). Вначале подшипник был разработан Э. Дрекслером с атомами N в составе. Однако после расчетов совместно с Р. Меркле эти атомы были заменены на атомы S, поскольку было предложено, что связи, образуемые S внутри подшипника, будут более стабильными.

Анализ, проведенный в [3] с помощью силового поля MM2 (Molecular Mechanics 2), показал, что энергетические барьеры для вращения оси имеют величину менее  $10^{-6}$  аДж (для структуры с атомами N в составе), радиальная жесткость подшипника равна 470 Н/м, а осевая – 360 Н/м. Следуя соглашению, принятому в предыдущих работах, значения энергии приведены в аттоджоулях (аДж) на молекулу. Это позволяет использовать последовательные единицы измерения для силы и жесткости и подчеркивает тот факт, что предметом анализа является единичное наноустройство, а не моли идентичных устройств ( $1 \text{ аДж} = 143.932 \text{ ккал/моль}$ ).

На основании расчетов осевой жесткости было выдвинуто предположение о том, что ось и корпус могут быть синтезированы отдельно, после чего ось может быть вставлена в корпус при помощи наноманипулятора.

Предполагается, что сборку молекулярных машин, подобных рассматриваемому подшипнику, можно будет осуществить с помощью процесса механосинтеза – процесса механического позиционирования реагирующих компонентов на специфические участки структур-мишеней. Теоретически такой процесс должен позволить выполнить различные синтетические операции на участках-мишенях с похожей реакционной способностью, которые различаются своим структурным расположением [3]. Молекулярные инструменты (реактивные молекулы и каркасы для их крепления к позиционирующим механизмам) для механосинтеза углеродных структур (алмаз, графит, нанотрубки) были предложены и теоретически проанализированы с помощью квантово-химических расчетов [8, 9]. Позиционирование атомов с помощью зондовых микроскопов и формирование химических связей

путем механического позиционирования были продемонстрированы экспериментально [10, 11].

Рассматриваемый молекулярный подшипник был первоначально предложен для работы в качестве компоненты механосинтетической молекулярно-производственной системы, но в принципе может быть применен и для других целей.

### 1. Методы (процесс исследования)

Расчеты были произведены с помощью пакета квантово-химических расчетов PC-GAMESS версии 7.1 [12], программного пакета CPMD версии 3.11 [13] и программы PRIRODA [14] на кластерных установках суперкомпьютерного центра коллективного пользования Казанского Научного Центра РАН.

Использовался полуэмпирический метод AM1 и методы теории функционала плотности.

Расчеты молекулярной динамики производились с помощью программы CPMD. Поскольку подобные молекулярные машины систематически не исследовались ранее методами квантовой химии, особое внимание было уделено выбору адекватного метода расчетов. Для выявления наиболее подходящего метода были произведены расчеты геометрии небольших молекул, содержащих химические связи, аналогичные имеющимся в молекулярном подшипнике. Поскольку подшипник содержит связи C-S, H-Si, Si-C, C-C, C-H, C-O и углы S-C-S, Si-C-H, C-C-C, C-C-H, C-O-C, для оптимизации метода были выбраны следующие простые молекулы: сероуглерод, диметилловый эфир, циклопентан, метилсиан, тетраметилсилан.

Производилась оптимизация геометрии и вычисление траектории молекулярной динамики с использованием базиса плоских волн (plainwave) со значениями энергии обрезания набора плоских волн в диапазоне 60–200 Ry с использованием приближения обобщенного градиента (GGA), функционалов PBE (Perdew – Burke – Ernzerhof) [15] и BLYP (Becke – Lee – Yang – Parr) и псевдопотенциалов Труллера – Мартинса [16], входящих в комплект пакета CPMD.

Полученные результаты (табл. 1) имеют значение не только для данного молекулярного подшипника, но и для других предложенных моделей молекулярных машин, поскольку их структура является сходной. В результате для расчетов молекулярной динамики подшипника был выбран функционал PBE и энергия обрезания набора плоских волн 110 Ry.

Для поиска стационарных состояний, переходных структур, вычисления колебательных спектров и термодинамических расчетов для частей подшипника использовалась программа PC-GAMESS. Предварительные расчеты выполнялись с помощью полуэмпирического метода AM1 [17]. AM1 – полуэмпирический метод, в котором часть вычисляемых интегралов замещена эмпирически полученными данными, – используется для расчета органических молекул. Структуры, представляющие особый интерес, рассчитывались с помощью DFT (density functional theory) с использованием функционала B3LYP (гибридный функционал, состоящий из гибридного обменного функционала Бекке (B3) [18] и корреляционного функционала Ли – Янга – Парра (LYP) [19]) в базисных наборах 3-21G\*//6-311+(2d,p) [20, 21]. Метод B3LYP/3-21\* хорошо воспроизводит геометрические параметры набора тестовых молекул (отклонение для длин связей в пределах 0.005 нм, для углов в пределах 0.4°). Среднее абсолютное отклонение энергии реакции по набору G2 составляет для метода 3-21G\*//6-311+(2d,p) 0.022 аДж. Поскольку структура молекулярных машин может в настоящее время изучаться только теоретическими методами, для обеспечения достоверности результатов необходимо использование

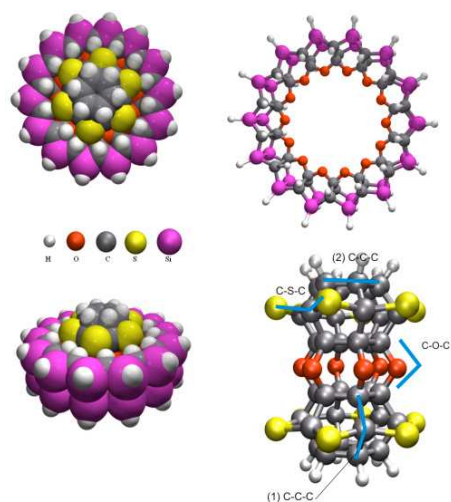


Рис. 1. Молекулярный подшипник. Слева – общий вид, справа – корпус (сверху) и ось (снизу)

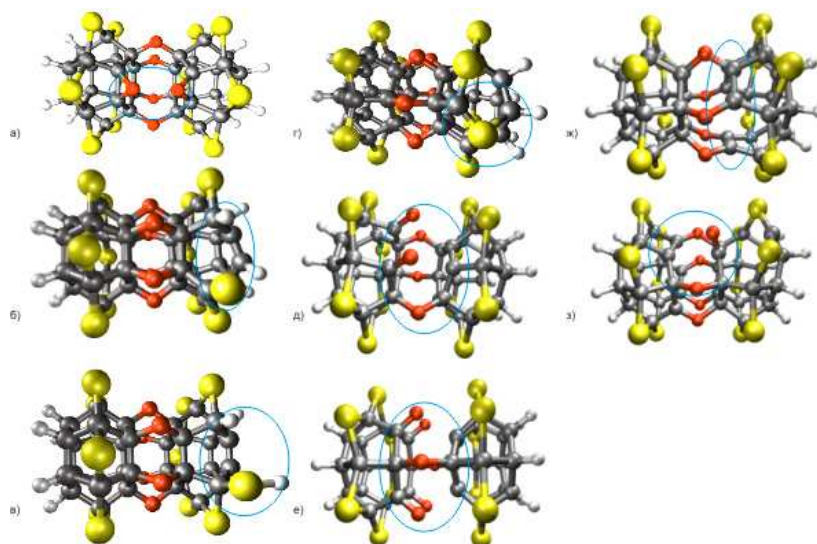


Рис. 2. Обнаруженные нарушения структуры оси подшипника, полученные путем случайного смещения координат с последующей оптимизацией

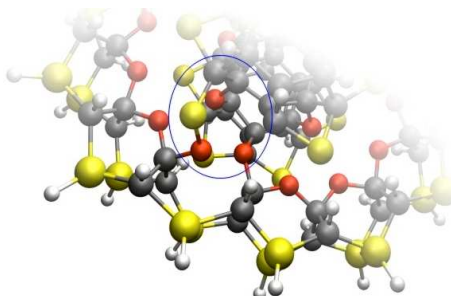


Рис. 3. Нарушение, возникающее в результате взаимодействия между корпусом и осью

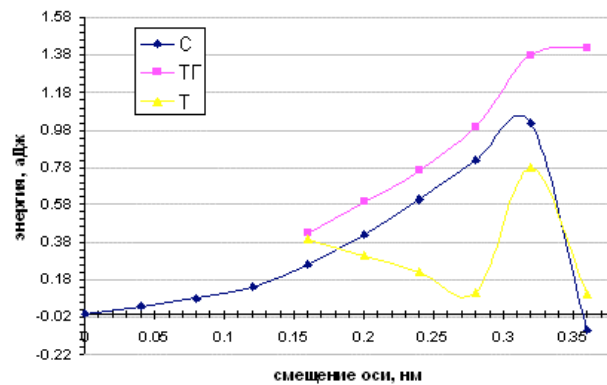


Рис. 4. Изменение энергии в процессе извлечения оси из корпуса подшипника: С – синглетное состояние, ТГ – энергия триплетного состояния для структуры, оптимизированной для структуры, оптимизированной в синглетном состоянии, Т – энергия структуры, оптимизированной в триплетном состоянии

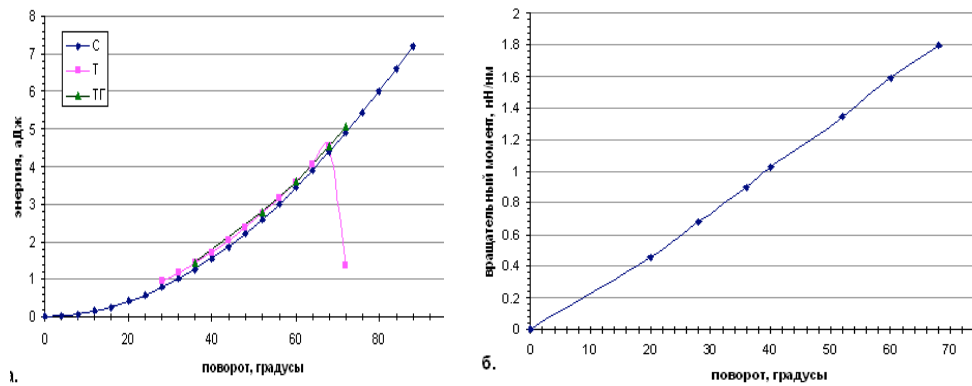


Рис. 5. Влияние степени скручивания на жесткость оси подшипника. (а) Зависимость потенциальной энергии системы (аДж) от степени скручивания оси. С – синглетное состояние, ТГ – энергия триплетного состояния для структуры, оптимизированной в синглетном состоянии, Т – энергия структуры, оптимизированной в триплетном состоянии. (б) Зависимость вращательного момента от степени скручивания оси

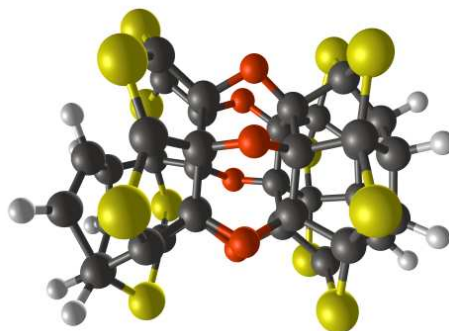


Рис. 6. Нарушение структуры оси в процессе скручивания при переходе в триплетное состояние

Табл. 1

Сравнение результатов расчета при различных функционалах для оптимизации метода теории функционала плотности в программе CPMD

Энергия обрезания набора плоских волн, $R_y$	Отклонение длины связи C–C от экс- периментальных данных, нм		Отклонение величины угла C–S–C от экспери- ментальных данных, град		Отклонение величины угла C–O–C от экспери- ментальных данных, град	
	PBE	BLYP	PBE	BLYP	PBE	BLYP
100	–	–	0.141	0.632	–0.125	–
e 110	0.0046	–	0.182	0.548	–0.145	–0.673
120	0.0050	–0.0055	0.043	0.612	–0.223	–0.677
130	0.0050	–0.0055	0.12	0.532	–0.1	–0.684
140	0.0050	–0.0056	0.084	0.534	–0.11	–0.878
150	0.0049	–0.0057	0.142	0.575	–	–
160	0.0049	–0.0058	0.096	0.493	–0.199	–0.89
170	0.0049	–0.0058	–	–	–0.123	–0.675
180	0.0049	–0.0054	–	–	–0.312	–1.081
190	0.0049	–0.0058	–	–	–0.332	–0.767

различных методов, а также различных программных пакетов. Поэтому дополнительно к программе PC-GAMESS использовалась программа PRIRODA, в которой расчеты производились с помощью функционала BLYP в базе B1 [22].

Расчеты молекулярной динамики методом AM1 выполнялись с помощью программы NuregChem.

## 2. Результаты

**2.1. Геометрические характеристики структуры подшипника.** Геометрия подшипника исследовалась с помощью методов: молекулярной механикой MM+ и теорией функционала плотности DFT. Расчет молекулярной механики для подшипника показал соответствие с данными, полученными Э. Дрекслером. Для оценки изменения геометрии подшипника использовались следующие параметры: средние радиусы кольца из атомов S и кольца из атомов O оси подшипника, кольца из атомов Si и кольца из атомов O корпуса подшипника, поскольку они показывают изменение расстояния между корпусом и осью подшипника, а среднее квадратичное отклонение от этих радиусов отражает изменение углов в подшипнике. Расчет геометрической оптимизации с помощью DFT показал, что отклонение вышеуказанных геометрических параметров подшипника от параметров, полученных после расчета геометрии молекулярной механикой, находится в пределах от 0.00045 до 0.0067 нм (см. также табл. 2).

В табл. 3 приведены значения отдельных углов и длин связей оси подшипника, рассчитанные различными методами. Результаты, полученные различными методами, в целом хорошо согласуются между собой, а также с данными, полученными ранее [3]. Значения длин связей несущественно отличаются от значений, имеющих-ся в простых молекулах. Значение угла C–O–C меньше на  $2.7^\circ$  величины угла в диметилевоом эфире, а значение угла C–S–C на  $16^\circ$  меньше такового в тиоэфире.

### 2.2. Стабильность подшипника.

**2.2.1. Стабильность подшипника без нагрузки.** Поскольку данный подшипник изначально разрабатывался для функционирования в вакууме, его струк-

Табл. 2

Сравнение геометрических характеристик подшипника, полученных расчетом геометрической оптимизации с помощью методов: теории функционала плотности DFT в программе CPMD и молекулярной механики MM+ в программе HyperChem

Части молекулярного подшипника	средний радиус, нм		Среднее квадратичное отклонение от идеальной окружности, нм	
	MM+	DFT PBE/plainwave	MM+	DFT BLYP/plainwave
Кольцо из атомов O корпуса подшипника	0.4752	0.4851	0.0019	0.006
Кольцо из атомов Si корпуса подшипника	0.7570	0.7653	0.0016	0.0083
Кольцо из атомов O оси подшипника	0.2378	0.2375	0.0003	0.0007
Кольцо из атомов S оси подшипника	0.3505	0.3540	0.00006	0.0009

Табл. 3

Геометрические параметры оси подшипника. Углы (три атома) в градусах и длины связей (два атома в обозначении) в нанометрах

Параметр	BLYP/B1	PBE/plainwave	B3LYP/3-21G*	AM1	MM+
C-O-C	106.340	107.843	108.412	108.974	110.515
C-S-C	75.950	77.63	82.987	82.833	80.36
C-C-C (1)	110.111	112.164	109.248	110.179	111.245
C-C-C (2)	120.000	120.009	120	119.993	120.003
C-O	0.1487	0.1431	0.14432	0.14461	0.14473
C-C (1)	0.15505	0.1536	0.1552	0.1553	0.1559
C-C (2)	0.15636	1.5224	0.1513	0.1507	0.1495
C-S	0.19993	0.191	0.829	0.1824	0.187

тура и функционирование не могут быть нарушены в результате взаимодействия с молекулами окружающей среды.

Частота спонтанного возникновения некоторого нарушения  $i$  в структуре подшипника может быть оценена с помощью уравнения Эйринга [23]:

$$k_i(T) = \frac{k_B T}{h} \exp(-\Delta G_a / RT), \quad (1)$$

где  $T$  – температура,  $k_B$  – константа Больцмана,  $h$  – постоянная Планка,  $\Delta G_a$  – разница свободных энергий Гиббса реагента и активированного комплекса,  $R$  – газовая постоянная. Исходя из предположения о том, что любая химическая перестройка приводит к выходу молекулярной машины из строя, общая частота поломки может быть рассчитана как:

$$k_f = \sum_i c_i k_i - \prod k_i^{c_i}, \quad (2)$$

где  $k_f$  – частота выхода молекулярного механизма из строя,  $k_i$  – частота  $i$ -го нарушения,  $c_i$  – число одинаковых структурных элементов в молекулярном механизме, где может произойти данное нарушение.

Табл. 4

Значение  $\Delta G$  (аДж) при  $T = 298$  К, вычисленное различными методами для перестроек, показанных на рис. 2) в нанометрах

Вид перестройки	AM1	V3LYP/3-21G*	V3LYP/3-21G*// V3LYP/6-311G*	BLYP/B1
<i>a</i>	0.2209	0.8632	0.7168	0.7190
<i>b</i>	0.0796	0.1119	0.0666	0.0504
<i>в</i>	-0.0312	-0.0799	-0.1031	-0.0531
<i>з</i>	0.3052	0.6995	0.6290	0.6043
<i>д</i>	0.5142	0.6568	0.4933	0.3840
<i>e</i>	1.1183	1.5348	1.2649	-

При оценке стабильности подшипника при комнатной температуре (при  $T = 298$  К) из расчета можно исключить реакции с энергией активации больше 0.320 аДж, поскольку их суммарный вклад в  $k_f$  значительно меньше  $10^{-18} \text{ с}^{-1}$ , то есть меньше вклада поломок, возникающих вследствие действия фоновой радиации [3].

Не существует систематического способа обнаружения всех возможных перестроек в структуре подшипника. Поэтому для поиска возможных нарушений был использован описанный ниже способ.

Исходя из координат атомов оптимизированного подшипника, был сгенерирован набор структур из 100 структур с атомами, смещенными случайным образом в диапазоне 0.04–0.09 нм. Для данных структур была выполнена оптимизация геометрии методом AM1, который показал, что все оптимизированные структуры со смещением до 0.08 нм представляли собой исходную конфигурацию подшипника без каких-либо смещений в структуре. При смещении 0.09 нм 44% структур имели перестройки в оси подшипника (рис. 2). Изменение энергии Гиббса для всех видов перестроек приведены в табл. 4.

Реакция перестройки в структуру (в) энергетически выгодна, однако вычисленное значение энергии активации составляет + 0.504 аДж, что значительно выше минимально допустимого барьера +0.320 аДж. Для перестановки (б) энергия активации составляет +0.560 аДж. Структуры (ж) и (з) являются стационарными состояниями при расчете методом AM1, их оптимизация методами DFT дает исходную неповрежденную структуру оси. Оптимизация структуры (е) дает исходную структуру только при расчетах BLYP/B1.

Используя полученные данные, а также формулы (1) и (2) можно вычислить, что частота поломок  $k_f \leq 2 \cdot 10^{-10} \text{ с}^{-1}$ , чему соответствует среднее время жизни не менее 600 лет.

Класс перестроек, которые не могут быть обнаружены таким анализом, включает в себя нарушения, связанные с взаимодействием оси и корпуса. Для их выявления были произведены расчеты стационарных состояний для структур со сдвинутым положением оси относительно центра. Единственная обнаруженная в ходе анализа перестройка связана с образованием эфирных связей между осью и корпусом (рис. 3). Расчет методом AM1 показал, что  $\Delta G$  данной реакции составляет 0.828 аДж.

Дополнительно был произведен расчет траектории молекулярной динамики подшипника методом DFT BLYP продолжительностью 0.5 пс. Траектория молекулярной динамики подшипника рассчитывалась в условиях постоянного числа частиц, температуры и объема (канонический ансамбль) при температуре 400 К.



В ходе молекулярной динамики не было выявлено никаких перестроек. Расчет траектории молекулярной динамики в программе HyperChem с использованием метода AM1 в течение 10 пс при температуре 900 К также не выявил никаких перестроек.

### 2.2.2. Стабильность структуры подшипника в нагруженном состоянии.

**Повреждения, вызванные силой, приложенной вдоль оси подшипника.** Осевая жесткость для похожей структуры была вычислена в [3] с помощью анализа изменения энергии MM2<sup>1</sup> при сдвигах оси без оптимизации геометрии. Аналогичный анализ для рассматриваемой структуры дает величину жесткости  $\sim 120$  Н/м. Полученная таким образом жесткость может быть завышена, так как кривая зависимости энергии от смещения оси будет соответствовать реальной ситуации лишь при очень высокой скорости движения. Таким методом нельзя также установить возможные повреждения подшипника в результате взаимодействия кольца атомов S оси с кольцом атомов кислорода корпуса (например, в процессе вставки оси в корпус).

Для того чтобы исследовать данный вопрос, было произведено моделирование процесса извлечения оси из корпуса. Процесс моделировался серией последовательных сдвигов оси относительно корпуса с шагом 0.04 нм при фиксации части атомов корпуса и оси. Фиксированные атомы корпуса имитируют его соединение с содержащей подшипник структурой, а фиксированные атомы оси – его соединение с более длинной осью (или с манипулятором, осуществляющем «вставку» оси в корпус). В связи с тем, что оптимизация полной структуры подшипника требует значительных вычислительных ресурсов, расчет проводился методом AM1. После этого часть точек на полученной поверхности потенциальной энергии была рассчитана с помощью V3LYP/3-21G\*.

Результаты расчета показаны на рис. 4. Барьер для извлечения (вставки) оси из корпуса, таким образом, составляет 0.81 аДж. Оптимизированное триплетное состояние при сдвиге 0.32 нм соответствует разрыву одной из связей C–O в корпусе подшипника. Такое состояние более выгодно энергетически (–0.76 аДж AM1, –0.6 аДж DFT), но энергия, необходимая для синглет-триплетного перехода (0.15 аДж AM1, 0.11 аДж DFT), говорит о том, что при нормальной температуре триплетное состояние остается практически недоступным.

Значение осевой жесткости, вычисленное по данным рис. 4, составляет  $\sim 20$  Н/м.

**Повреждения, вызванные действием вращательного момента.** Крутильная жесткость оси подшипника ранее не рассматривалась. Для ее оценки была произведена серия оптимизаций структуры оси, в которых крайние атомы C фиксировались, при этом один конец оси оставался неподвижным (имитируя большую нагрузку), а второй поворачивался с шагом 4° ( $\sim 0.06$  рад).

Полученная кривая зависимости энергии от угла поворота показана на рис. 5, а. Поворот на угол больше 88° в приводит к разрыву имеющихся связей C–S и образованию новых таким образом, что структура как таковая не изменяется, но эксплуатировать подшипник в таком режиме, разумеется, нельзя.

Энергия оптимизированного триплетного состояния становится значительно меньше, начиная со смещения 68°. Триплетное состояние соответствует перестройке, показанной на рис. 6. Энергия, необходимая для синглет-триплетного перехода, составляет 0.17 аДж (AM1) и 0.5 аДж (DFT).

<sup>1</sup>Энергия MM2 – энергия напряжения геометрических параметров молекулы относительно энергии равновесного состояния

Величина вращательного момента для каждой структуры может быть рассчитана как сумма моментов каждого фиксированного атома. Полученная кривая изображена на рис. 5, б. Отсюда крутильная жесткость оси может быть оценена как  $\sim 0.026$  нН/нм·град, или  $\sim 1.14$  нН/нм·рад.

### Заключение

Впервые методами квантовой химии исследована стабильность молекулярного механизма – молекулярного подшипника. Расчет траектории молекулярной динамики в течение 0.5 пс методом DFT при  $T = 400$  К и в течение 10 пс при  $T = 900$  К методом AM1 не выявил перестроек в структуре. Исследование энергий активации для теоретически возможных перестроек показало, что среднее время жизни подшипника с учетом всех исследованных перестроек составляет не менее  $10^{10}$  с. Поворот оси на угол больше  $88^\circ$  приводит к разрыву имеющихся связей C–S и образованию новых таким образом, что структура как таковая не изменяется, но эксплуатироваться подшипник не может. Крутильная жесткость оси может быть оценена как  $\sim 0.026$  нН/нм·град или  $\sim 1.14$  нН/нм·рад. Эти результаты позволяют заключить, что высказанные ранее опасения относительно нестабильности искусственно спроектированных молекулярных машин не подтверждаются данным исследованием.

В работе использованы ресурсы суперкомпьютерного центра коллективного пользования КазНЦ РАН.

### Summary

*D.A. Alisheva, D.S. Tarasov, E.D. Izotova, N.I. Akberova.* Quantum Chemistry Study of Stability of Drexler–Merkle Molecular Nanobearing.

Various designs of molecular machines have been recently proposed. These designs, including molecular bearings, planetary gears and molecular pumps, were previously studied by methods of molecular mechanics. Thus, the question of chemical stability of such theoretical devices remains open. The paper presents the first quantum chemistry study of stability of diamondoid molecular machines, using Drexler–Merkle bearing as simplest but typical example. Several possible bearing failure modes are investigated, and conclusion is made that device lifetime at room temperature ( $T = 298$  K) exceeds  $10^{10}$  s.

**Key words:** nanosystems, nanobearing, semiempirical method AM1, DFT method, molecular dynamics.

### Литература

1. *Feynman R.* There's Plenty of room at the bottom: An invitation to enter a new field of physics // Engineering and Science. – 1960. – V. 23, No 5. – P. 22–36.
2. *Drexler K.E.* Molecular engineering: An approach to the development of general capabilities for molecular manipulation // Proc. Natl. Acad. Sci. – 1981. – V. 78, No 9. – P. 5275–5278.
3. *Drexler K.E.* Nanosystems. – N. Y.: John Wiley & Sons, 1992. – 576 p.
4. *Cagin T., Jaramillo-Botero A., Gao G., Goddard W.A.* Molecular mechanics and molecular dynamics analysis of Drexler-Merkle gears and neon pump // Nanotechnology. – 1998. – V. 9. – P. 143–152.
5. A Matter of Size: Triennial review of the National Nanotechnology Initiative. Chapter 5 // National council of NAS [Электронный ресурс]. – 2006. – Режим доступа: <http://www.nap.edu/catalog/11752.html>.

6. Productive Nanosystems. A technology roadmap // Battelle Memorial Institute and Foresight Nanotech Institute [Электронный ресурс]. – 2007. – Режим доступа: [http://foresight.org/roadmaps/Nanotech\\_Roadmap\\_2007\\_main.pdf](http://foresight.org/roadmaps/Nanotech_Roadmap_2007_main.pdf).
7. *Tuzun R.E., Noid D.W., Sumpter B.G.* The dynamics of molecular bearings // *Nanotechnology*. – 1995. – V. 6. – P. 64–74.
8. *Mann D.J., Peng J., Merkle R.C, Freitas A.R.* Theoretical analysis of diamond mechanosynthesis. Part II. C2 mediated growth of diamond C(110) surface via Si/Ge-triadamantane dimer placement tools // *J. Comput. Theor. Nanosci.* – 2004. – V. 1. – P. 71–80.
9. *Allis D.G., Drexler K.E.* Design and analysis of a molecular tool for carbon transfer in mechanosynthesis // *J. Comput. Theor. Nanosci.* – 2005. – V. 2. – P. 45–55.
10. *Eigler D.M., Schweizer E.K.* Positioning single atoms with a scanning tunneling microscope // *Nature*. – 1990. – V. 344 – P. 524–526.
11. *Oyabu N., Custance O., Yi I., Sugawara Y., Morita S.* Mechanical vertical manipulation of selected single atoms by soft nanoindentation using near contact atomic force microscopy // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 90 – P. 176102.
12. *Granovsky A.A.* PC GAMESS version 7.1. – Режим доступа: <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>.
13. CPMD V3.11, copyright International Business Machines Corporation (1990–2006) and Max Planck Institute fuer Festkoerperforschung Stuttgart (1995–2001). – Режим доступа: [www.cpmid.org](http://www.cpmid.org).
14. *Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A.* PRIRODA\_04: a quantum\_chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing // *Russ. Chem. Bull.* – 2005. – V. 54. – P. 820–826.
15. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – V. 77. – P. 3865–3868.
16. *Troullier N., Martins J.L.* Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // *Phys. Rev.* – 1991. – V. B43. – P. 1993.
17. *Dewar M.J.S., Zoebisch E.G., Healy E.F., Stewart J.J.P.* AM1 – a new general-purpose quantum-mechanical molecular model // *J. Am. Chem. Soc.* – 1985. – V. 107. – P. 3902–3909.
18. *Becke A.D.* Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // *J. Chem. Phys.* – 1993. – V. 98. – P. 5648–5652.
19. *Lee C., Yang W., Parr R.G.* Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // *Phys. Rev.* – 1988. – V. 37. – P. 785–789.
20. *Pietro W.J., Francl M.M., Hehre W.J., DeFrees D.J., Pople J.A., Binkley J.S.* Self-Consistent Molecular Orbital Methods. XXIV. Supplemented small split-valence basis sets for second-row elements // *J. Am. Chem. Soc.* – 1982. – V. 104. – P. 5039.
21. *Ditchfield R., Hehre W.J., Pople J.A.* Self-Consistent molecular orbital methods. IX. An extended gaussian-type basis for molecular orbital studies of organic molecules // *Chem. Phys.* – 1971. – V. 54. – P. 724.
22. *Laikov D.N.* A new class of atomic basis functions for accurate electronic structure calculations of molecules // *Chem. Phys. Lett.* – 2005. – V. 416. – P. 116–120.

- 
23. *Fersht A.* Structure and mechanism in protein science. A guide to enzyme catalysis and protein folding. – N. Y.: W.H. Freeman and Company, 1999. – 631 p.

Поступила в редакцию  
10.09.08

---

**Алишева Диана Айратовна** – студент кафедры биохимии Казанского государственного университета.

E-mail: *dalisheva@mntech.ru*

**Тарасов Денис Станиславович** – кандидат биологических наук, старший научный сотрудник Отдела информационных технологий КазНЦ РАН.

E-mail: *dtarasov@mntech.ru*

**Изотова Екатерина Дмитриевна** – студент кафедры биохимии Казанского государственного университета.

E-mail: *ied@mntech.ru*

**Акберова Наталья Ивановна** – кандидат биологических наук, старший научный сотрудник кафедры биохимии Казанского государственного университета.

E-mail: *nakberov@ksu.ru*