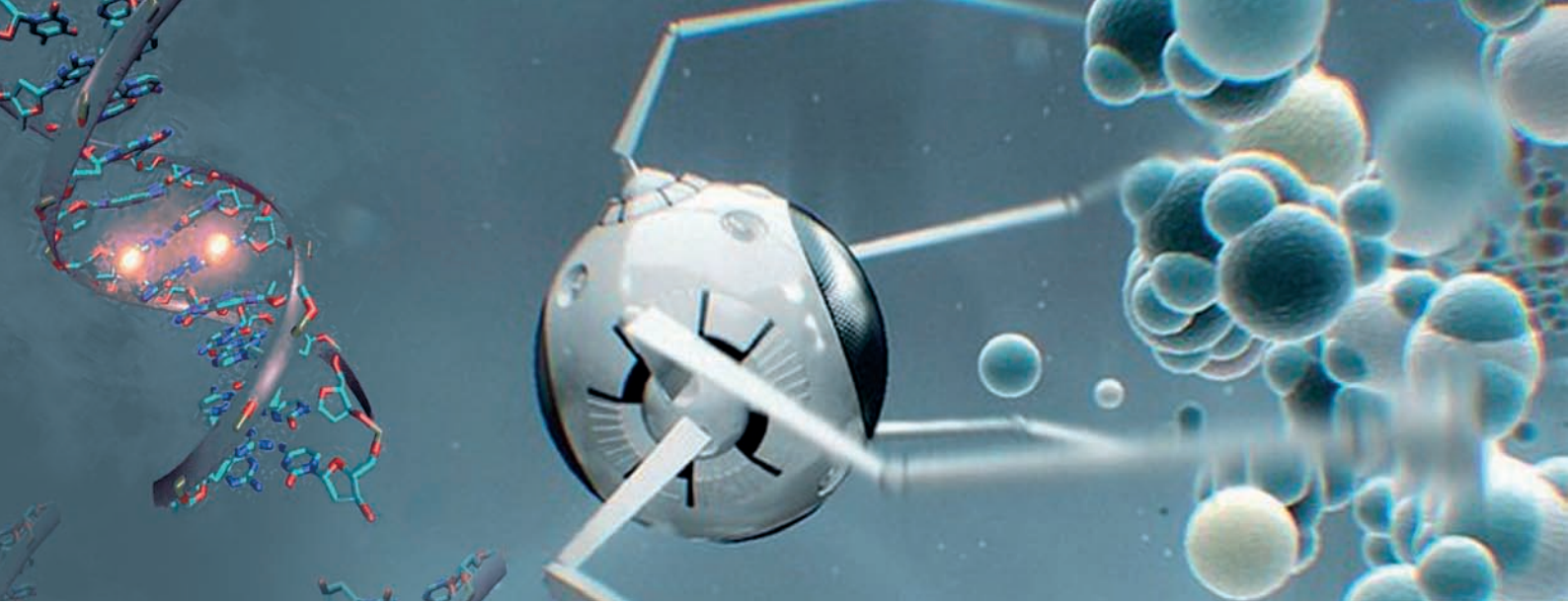


طراحی و مشخصه‌سازی نانوربات‌های زیستی

راضیه فرازکیش/ گروه مهندسی کامپیوتر/ دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران جنوب/ r.farazkish@srbiau.ac.ir

چکیده

نانوربات یک سیستم رباتیک کنترل‌شده در مقیاس نانو (10^{-9}) است. این ربزربات دارای ویژگی‌هایی هم‌چون قابلیت استفاده در فضاهای کوچک با انعطاف‌پذیری بالا، قابلیت تابع‌پذیری بالا و سازگار در شرایط مختلف می‌باشد. تکنولوژی نانورباتیک آن‌چنان سریع درحال پیشرفت است که به‌زودی زندگی انسان‌ها را به‌طور کلی دگرگون خواهد کرد؛ این تغییرات با استفاده از طراحی نانوربات‌های زیستی است که در بدن انسان قرار گرفته و نقش محافظ و یا درمان‌گر را ایفا می‌کنند. این ریزماشین‌های هوشمند قادرند چندین نسخه از خودشان تهیه کنند و جایگزین بافت‌های فرسوده و آسیب‌دیده نمایند. امروزه فناوری طراحی و ساخت نانوربات، به‌دلیل گستردگی کاربردهایی که در حوزه‌های مختلف علمی هم‌چون پزشکی، زیست‌فناوری، مکانیک، الکترونیک، سیستم‌های فیزیکی و سیستم‌های ارتباطی دارد، مورد توجه بسیاری از دانشمندان و صنایع مختلف قرار گرفته است. در حال حاضر، طراحی و ساخت نانوربات زیستی در زمینه پزشکی، سلامت و داروسازی بیش از سایر حوزه‌ها مورد توجه است و طی چند سال گذشته نیز پیشرفت‌های زیادی داشته‌است. اما ساخت این ربزربات‌ها به‌دلیل پیچیدگی‌های بدن انسان به‌طوری که قادر به حرکت در میان سرخرگ‌ها و شریان‌های بدن و بررسی و شناسایی بیماری‌ها باشد، به تحقیقات بیشتری نیاز دارد. در این مقاله به بررسی طراحی و مشخصه‌سازی نانوربات‌های زیستی می‌پردازیم که به‌طور گسترده برای شناسایی و درمان بسیاری از بیماری‌ها به‌کار می‌روند.

کلمات کلیدی: ادوات نانو، طراحی سیستم‌های نانورباتیک، نانوربات‌های زیستی

Design and Characterization of Bio-nanorobots

Razieh Farazkish/ Department of Computer Engineering, South Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran
r.farazkish@srbiau.ac.ir

Abstract:

Nanorabot is a nano-controlled robotic system. This tiny robot has features such as the ability to use in small spaces with high flexibility, high responsiveness and adaptability in a variety of situations. Nanorobotic is so fast-paced that it will soon change human's life; these changes are based on the design of biological nanorobos that are located in the human body and play the role of protector or therapist. This tiny intelligent machines can produce multiple copies of themselves and replace worn and damaged their tissues. Today, the technology of designing and manufacturing nano-robots has attracted many scientists and industries due to the wide range of applications in various fields of science such as medicine, biotechnology, mechanics, electronics, physical systems and communication systems. Nowadays, the design and manufacturing of biological nanorobots in the field of medicine, health and pharmacy is more than other areas and has been making a lot of progress over the past few years. However ,the construction of these tiny robots requires more research because of the complexity of the human body, which is able to move through the arteries of the body and to investigate and identify diseases. In this article,we study the design and characterization of biological nanorobots that are widely used to identify and treat many diseases.

Keywords: Nano devices, Nanorobotic systems design, Bio-nanorobots.

[Downloaded from kiaeee.ir on 2026-11-25]

۱- مقدمه

یکی از مهم‌ترین فناوری‌های روز دنیا دانش نانوفناوری است که گستره وسیعی از علوم مختلف را در برگرفته و توجه بسیاری از محققان را در سراسر دنیا به خود جلب نموده‌است[۷-۱]. نانورباتیک نیز به‌عنوان یکی از شاخه‌های بنیادی فناوری نانو، علم جدیدی است که شامل طراحی، ساخت، کنترل و برنامه‌نویسی نانوربات‌هاست.

منبع تولید انرژی مورد نیاز نانوربات، شامل انرژی جنبشی سیال (هم‌چون خون)، پرتوهای الکترومغناطیسی، تغییرات دمایی و ایجاد تشعشعات مناسب است که در حال حاضر در محیط‌های مختلف زیستی قابل‌استفاده می‌باشد.

نکته مهمی که در نانوربات‌های زیستی وجود دارد، تامین نیروی محرکه آن‌هاست که بیشتر از طریق جریان خون صورت می‌گیرد؛ به‌همین علت باید با رعایت نکات ایمنی برای بیمار انجام شود. سیستم انتقال اطلاعات و کنترل حرکت نانوربات‌ها در بدن نیز باید طوری باشد که به‌راحتی از خارج بدن، قابل بررسی و شناسایی باشد. همین موضوع در بررسی مشکلات درون سلول‌ها نیز قابل تعمیم است؛ بدین معنا که می‌توان نانوماشین‌های ترمیم‌کننده سلول با ابزار و گیرنده‌های خاص در مقیاس مولکولی طراحی نمود تا بتواند با استفاده از جریان خون، به سلول هدف رسیده و مشکلات موجود را شناسایی نماید[۸].

علی‌رغم تلاش‌های صورت‌گرفته، طراحی و ساخت نانوربات‌ها در زمینه‌های مختلف با مشکلات گوناگونی مواجه بوده و ارتباط بین بخش‌های مختلف در یک نانوربات، بسیار سخت و پیچیده است. بنابراین، ساختن نانوربات زیستی که بتواند با شرایط و اهداف مورد نظر، وارد بدن شده و عملکرد موثری داشته باشد برای محققان اهمیت بالایی دارد.

با استفاده از دانش نانوفناوری می‌توان نانوربات‌های زیستی طراحی کرد که قادرند چندین نسخه از خودشان تهیه کنند و دقت بالایی در انجام عملیات خاص و تکرارشونده دارند. در آینده نانوربات‌های هوشمند در مغز و بدن هر انسانی به تعداد زیاد وجود خواهند داشت و انسان را از ابتلا به انواع بیماری‌ها مصون می‌دارند و حتی می‌توانند روند پیر شدن بشر را به تعویق بیاندازند؛ همچنین قادر خواهند بود قدرت جسمانی و حافظه را نیز تقویت نمایند. با استفاده از فناوری نانو دستیابی به انرژی خورشیدی نیز امکان‌پذیر خواهد شد. انرژی خورشیدی قابل تبدیل و استفاده به اشکال مختلف انرژی است و بشر را از منابع دیگر بی‌نیاز می‌کند[۸].

نانوربات‌ها دارای امکانات بالقوه‌ای هستند که با اجتماع و قرارگیری به‌صورت کلونی قادرند به‌طور موشکافانه و دقیق از سیستم موردنظر حفاظت کنند. در واقع با ساختاری اتمی و یا مولکولی، در یک فرآیند شناخته‌شده قرار داده می‌شوند تا چرخه مورد نظر را کامل کنند. فناوری نانورباتیک آن‌قدر سریع درحال پیشرفت است که به‌یقین زندگی انسان‌ها را از اواسط قرن جاری به‌کلی متحول خواهد کرد. این تغییرات شامل از بین رفتن بسیاری از بیماری‌ها، کاهش عوامل و عوارض بسیاری از امراض و حتی تغییر روند انجام جراحی‌ها است [۹].

۲-ارزیابی روند پیشرفت نانوربات در دنیا

طراحی و ساخت نانوربات‌ها در سال‌های اخیر پیشرفت چشم‌گیری داشته‌است؛ ولی به‌دلیل پیچیدگی‌های موجود، هم‌چنان در مراحل تحقیقاتی و آزمایشگاهی قرار دارد. رسیدن به مرحله تجاری‌سازی، مستلزم بررسی‌های بیشتر و انجام آزمایشات فراوانی است که روند رسیدن به بلوغ را کند کرده است. در ادامه روند انجام برخی از این تحقیقات آورده شده‌است.

۲-۱- نانوربات در زمینه پزشکی

در دنیای پیشرفته امروز، بسیاری از علوم به یاری علم پزشکی آمده‌اند تا با بالا بردن توانمندی تجهیزات پزشکی و درمانی، در افزایش سلامتی، طول عمر، تشخیص و درمان بیماری‌ها نقش موثری را ایفا کنند.

یکی از مهم‌ترین چالش‌های دانشمندان در زمینه درمان، رهایش دارو در مکان و زمان دقیق با بالاترین عملکرد ممکن است. داروهای موجود در بازار، علی‌رغم مبارزه با عوامل بیماری‌زا (ویروس، باکتری و غیره)، سلول‌های سالم و بیمار را با هم درگیر می‌سازد که این موضوع در مورد بیماری‌های خاصی هم‌چون سرطان و یا HIV بیشتر مشاهده می‌شود. علاوه بر این، در برخی بیماری‌ها عملکرد مؤثر دارو در مدت زمان کوتاه، بسیار پایین است و این مساله موجب طولانی شدن مدت بیماری و آسیب رساندن عوامل بیماری به سایر نقاط بدن می‌شود. به همین دلیل، یکی از اهداف محققان، طراحی و ساخت نانوربات‌هایی است که بتواند رهایش دارو را به مکان خاص در بدن، بدون آسیب رساندن به سلول‌های سالم انجام داده و هم‌چنین به مدت طولانی قادر به کنترل و فعالیت درون سلول باشد[۱۰].

در همین راستا، محققان دانشگاه تگزاس، موفق به ساخت نانوربات‌ی شدند که می‌تواند درون سلول قرار گیرد. این نانوربات پیشرفته با داشتن سرعت ۱۸هزار دور بر دقیقه، عنوان سریع‌ترین و کوچک‌ترین نانوربات را به خود اختصاص داده‌است. نانوموتور ساخته شده قادر به رهایش و کنترل دارو از سطح نانوساختار خود و با طول عمر بیشتر از نانوموتورهای پیشین است. موفقیت این پروژه در درمان بیماری‌های مختلف و اثر مستقیم روی سلول‌های بیمار، بسیار قابل‌توجه خواهد بود[۱۰].

چالش‌های گوناگونی در مسیر استفاده از نانوربات‌ها در صنعت پزشکی وجود دارد. با توجه به این‌که بدن انسان از تمامی ربات‌های ساخته شده پیچیده‌تر است، بنابراین ساخت نانوربات‌ی که بتواند در بدن انسان نفوذ کرده و ماموریت‌های خود را به‌طور کامل انجام دهد، مساله بسیار مهمی است.

ساخت مواد کافی جهت آزمایش ایده‌های موجود در ساخت نانوربات، یافتن سیستم مناسب جهت بررسی نتایج آزمایش‌ها اعم از میزان اثربخشی واقعی نانوربات از حرکت تا رسیدن به مقصد، رساندن دارو به نانوربات و تکرار کلیه این مراحل و سپس تاییدیه‌های لازم از جمله سازمان غذا و دارو و انجام آزمایش‌ها روی حیوانات و انسان‌ها موجب می‌شود که ساخت نانوربات‌ها از ۸ تا ۱۰ سال به طول انجامد. با وجود سرعت اندک این حوزه، دانشمندان به تحقق این هدف، خوش‌بین هستند و امیدوارند با فائق آمدن بر مشکلات موجود، نانوربات‌های مناسب این ایده را طراحی و تجاری‌سازی کنند[۱۱].

۲-۲- نانوربات در زیست‌فناوری

با توجه به این‌که DNA ها قابلیت تغییر شکل دنیای محاسباتی را دارند، محققان زیستی در تلاش هستند که از این توانمندی برای تشخیص و درمان بیماری‌ها استفاده کنند. اوریگامی DNA نخستین قدم در ساخت نانورباتی است که قادر به انجام عملیات منطقی خاصی می‌باشد. هر اندازه که ربات‌های DNA بیشتری به بدن تزریق شوند، عملیات پیچیده‌تری در بدن انسان قابل‌انجام خواهد بود. به‌طور مثال، ساخت یک نانوربات تک مولکولی با چرخ‌های کربنی و قابلیت کنترل

[Downloaded from kiaeee.ir on 2026-11-25]

دما، یکی از تحقیقاتی است که دانشمندان در نظر دارند از آن برای حمل دارو به سلول‌های مشخص استفاده کنند[۱۰].
یکی دیگر از اهداف متخصصان، استفاده از نانوربات‌های DNA برای درمان بیماری سرطان است؛ به‌طوری‌که بتوانند بدون کوچک‌ترین تماس با سلول‌های سالم، سلول‌های سرطانی را نابود کنند[۱۰].
یک بخش عمده از تحقیقات در حال مطالعه در زمینه زیست‌فناوری، استفاده از ویروس‌ها و باکتری‌های مهندسی‌شده است. در سال‌های اخیر، امکان دستکاری ویروس و باکتری با هدف اولیه تغییر فعالیت آن‌ها از عامل بیماری‌زا به عامل درمان‌کننده، فراهم شده‌است. به این ساختارهای دستکاری‌شده، باکتری یا ویروس مهندسی‌شده گفته می‌شود. این ساختارها، به‌صورت ریزربات‌هایی هستند که می‌توانند در درمان و شناسایی بیماری بسیار مؤثر و قوی باشند. در یک طرح تحقیقاتی، دانشمندان در جستجوی راهی هستند تا بتوانند ربات‌ویروس و ربات‌باکتری را طراحی کنند که سلول‌های توموری و سرطانی را پیدا کرده و آن‌ها را ببلعد؛ بعد از اتمام فرآیند نیز به‌علت نداشتن غذا از بین برود. محققان امیدوار هستند در صورت موفقیت در طراحی و ساخت این نانوربات، از روش مشابه آن در درمان سرطان مغز و گردن نیز بهره ببرند[۱۰].
استفاده از نانوربات‌های مهندسی‌شده نیز در مراکز مختلفی درحال بررسی است. اما کلیه این روش‌ها در مرحله بررسی کلینیکی قرار داشته و برای رسیدن به بازار هدف، مستلزم مطالعات بیشتر است.

۲-۳-نانوربات در بایومکانیک و نانومکانیک

در بخش‌های قبلی پژوهش انجام شده، پیشرفت طراحی و ساخت نانوربات‌ها در زمینه پزشکی و زیست‌فناوری بررسی و ارایه شد. باید اذغان داشت که سرعت طراحی و ساخت نانوربات در زمینه مکانیکی (بایومکانیک و نانومکانیک) کندتر از سایر حوزه‌های تعریف‌شده می‌باشد.
از پروژه‌های موفق در زمینه مکانیکی، ابداع روشی است که در آن از یک دستگاه جوش نانورباتیک به‌عنوان دستگاه جوش نقطه‌ای استفاده می‌شود. این دستگاه از نانولوله‌های کربنی پر شده با مس ساخته شده‌است. این ساختار درون یک میکروسکوپ الکترونی عبوری قرار داده شده که از آن برای گداختن و اتصال نانوساختارها به‌هم استفاده می‌شود. با اعمال ولتاژ و ذوب شدن هسته‌های مسی با ضخامت ۴۰ تا ۸۰ نانومتر، مس از درون نانولوله‌ها جریان یافته و می‌تواند باعث لحیم شدن یک نانولوله به نانولوله دیگری شود. کنترل مکانی و زمانی و استفاده از جریان بسیار کم برای ذوب شدن مس در زمان فرآیند از مزایایی است که در صنعت نیمه‌هادی مورد توجه متخصصان این حوزه قرار گرفته است[۱۲].
یکی دیگر از کاربردهای نانوربات‌ها در زمینه تعمیر مدارها و ابزارهای الکترونیکی است. با پیشرفت صنعت الکترونیک، ابزارهای تعمیر و نگهداری آن‌ها نیز باید پیچیده‌تر و پیشرفته‌تر از گذشته باشد. ساخت نانوموتورهایی که بتواند خراش‌های بسیار کوچک را برطرف کند، از اهداف مهم در این حوزه است. محققان دانشگاه کالیفرنیا با الهام از سیستم دفاعی بدن، نانوموتوری ساخته‌اند که قادر به تشخیص معایب در ابزارهای الکترونیکی بوده و با نانوذرات طلا و پلاتین درون یک سیال وظیفه خودترمیمی را به‌خوبی انجام می‌دهد. از این نانوموتور می‌توان در بخش‌های مختلفی همچون حسگرهای انعطاف‌پذیر و اجزای الکترونیکی که به‌سختی قابل تعمیر هستند، استفاده کرد. البته این طرح در مراحل بررسی بیشتر قرار دارد و طراحان آن به تکمیل طراحی و ساخت این نانوربات امیدوارند[۱۳].
محققان از دانشگاه گرونینگن هلند نیز موفق به ساخت کوچک‌ترین نانوربات الکتریکی جهان در مقیاس نانو شده‌اند. این نانوربات، نخستین مدل مجهز به موتور است که می‌تواند توسط الکترون‌ها، روی یک سطح مسی حرکت به‌سمت جلو داشته باشد. در این نانوربات، برای ثابت ماندن مولکول، از شرایط خلاء و دمای بسیار پایین استفاده می‌شود. ساخت این نانوربات کوچک، قدم بسیار مهمی در راستای ساخت نانوربات‌های پیشرفته‌ای است که می‌توانند در سیستم‌های کنترلی موثر باشند[۱۴].
پروژه‌های گوناگون دیگری در دنیا در زمینه‌های نانومکانیک و بایومکانیک در حال انجام است؛ اما همان‌طور که اشاره شد، علاقه‌مندی و گستردگی پژوهش‌های ساخت نانوربات در زمینه زیست‌فناوری، پزشکی و درمان به مراتب بیشتر از حوزه مکانیکی است.

۳- ساختار نانوربات

همان‌طور که در بخش‌های پیشین اشاره شد، مهم‌ترین کاربرد نانوربات‌ها در زمینه پزشکی و زیست‌فناوری است؛ در این بخش به بررسی ساختار و عملکرد نانوربات‌های زیستی می‌پردازیم.
به‌طورکلی، دانش نانورباتیک به مطالعه طراحی، ساخت، برنامه‌نویسی و کنترل نانوربات‌ها می‌پردازد. نانوربات‌ها متشکل از هر ساختار فعال یا غیرفعال است که توانایی تحریک، دریافت، علامت‌دهی، پردازش اطلاعات، هوشمندی و رفتار جمعی را در مقیاس نانو داشته باشد [۱۱]. این توانمندی‌ها می‌تواند به تنهایی و یا به‌صورت ترکیبی توسط یک نانوربات به‌کار گرفته شود. بنابراین، همه نوع تحریک، دریافت و یا پردازش اطلاعات می‌تواند وجود داشته باشد که نانوربات‌ها را قادر به فعل و انفعالات متقابل و تاثیر روی کاربرد مورد نظر در مقیاس نانو کند. برخی از مشخصاتی که در عملکرد یک نانوربات مطلوب است، عبارتند از:

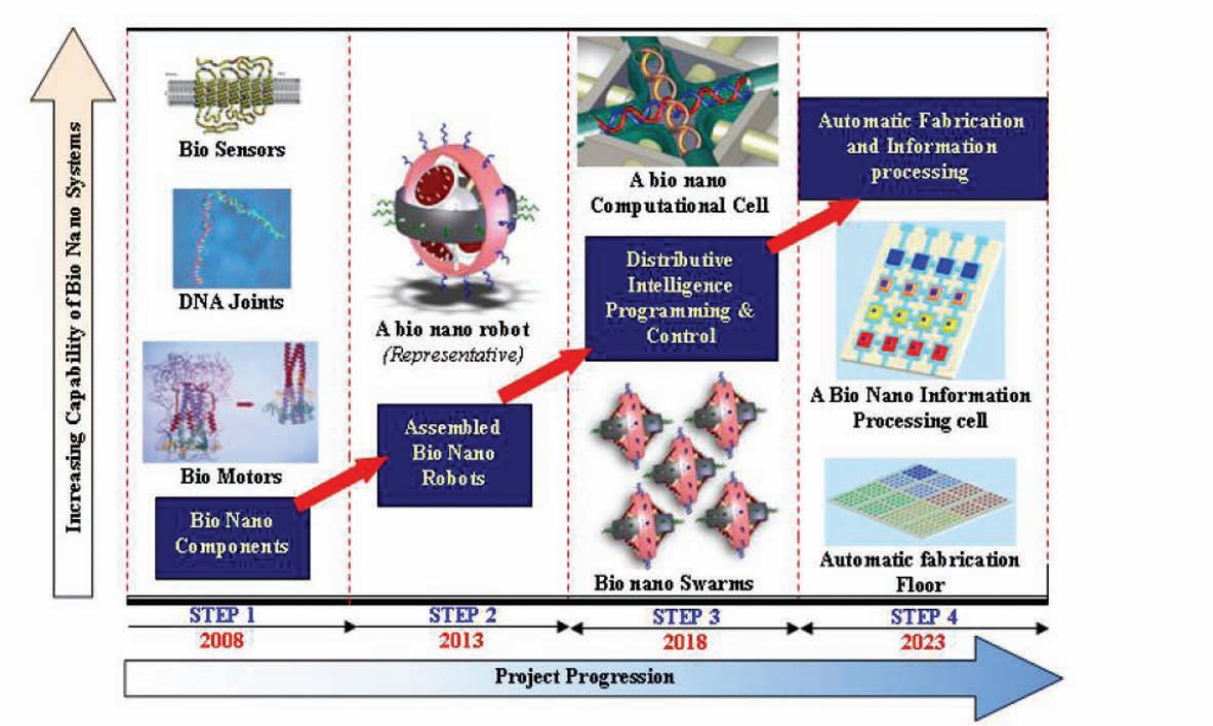
- هوش جمعی: عدم تمرکز و هوش توزیعی.
- رفتار مشارکتی: رفتار تکاملی.
- خودسازندگی و تکرار: انجام عملیات تکرارشونده و قابلیت نگهداری و تعمیر در مقیاس نانو.
- پردازش اطلاعات و برنامه‌نویسی نانو.
- معماری واسط جهان میکرو به نانو: یک معماری که دسترسی سریع به نانوربات‌ها را کنترل کرده و نگهداری آن‌ها را فراهم سازد.

نانوربات‌ها با چشم غیرمسلح قابل‌رویت نیستند؛ در نتیجه دستکاری و کار با آن‌ها دشوار خواهد بود. تکنیک‌هایی مانند Scanning Electron Microscopy(SEM) و یا Atomic Force Microscopy (AFM) برای ایجاد یک واسط قابل‌رویت و قابل لمس به‌کار گرفته می‌شود تا قادر به درک ساختار مولکولی این ادوات در مقیاس نانو شویم. تکنیک‌های واقعیت مجازی نیز، در تحقیقات نانوتکنولوژی و بیوتکنولوژی به‌عنوان روشی برای افزایش دقت و درک بهتر به‌کار می‌روند[۱۵].
یکی از مهم‌ترین چالش‌های گسترش نانوربات‌ها و نانوماشین‌ها، طراحی و ساخت دشوار آن‌ها است که در ادامه به آن می‌پردازیم.

۴- طراحی سیستم‌های نانورباتیک

طراحی سیستم‌های نانورباتیک با علوم گوناگونی مرتبط است. قوانین عملی برای نانوربات‌ها به نوع نانوذراتی که ما درون آن‌ها به‌کار می‌بریم، بستگی دارد. همان‌طورکه پیش‌تر اشاره شد، مهم‌ترین

[Downloaded from kiaeee.ir on 2026-11-25]



شکل ۱: روند طراحی نانوربات‌های زیستی [۱۲]

کاربرد نانوربات‌ها در علوم پزشکی است؛ بنابراین روند طراحی را برای نانوربات‌های زیستی درنظر می‌گیریم که این متشکل از المان‌های زیستی مانند پروتئین و DNA خواهند بود. درشکل (۱) روند این طراحی نشان داده شده‌است[۱۲].

همان‌طورکه در شکل (۱) مشاهده می‌شود، طراحی نانوربات‌های زیستی شامل ۴ مرحله است:

مرحله ۱: المان‌های زیستی

گسترش المان‌های نانوزیستی از سیستم‌های زیستی، نخستین مرحله از طراحی و گسترش یک نانوربات زیستی پیشرفته است. DNA، نانولوله‌های کربنی و نانوساختارها، کاندیدهای مناسبی برای مجتمع‌سازی و استقرار المان‌های نانوزیستی هستند.

مرحله ۲: گردآوری (اسمبل کردن) نانوربات‌های زیستی

مرحله بعدی شامل اسمبل کردن المان‌های نانوزیستی پایدار به مجموعه‌های پیچیده است. از آغاز این مرحله یک کتابخانه المان‌های نانوزیستی گسترش می‌یابد که شامل طبقه‌بندی‌های مختلفی مانند تحریک، منبع انرژی، حسگر، سیگنال‌دهی و غیره خواهد بود. در این مرحله، قادر به طراحی و گسترش نانوسیستم‌های زیستی خواهیم بود که مشخصات متحرک را ارتقا داده و می‌تواند به‌سمت مکان‌های مطلوب حرکت نماید.

مرحله ۳: هوش توزیعی، برنامه‌نویسی و کنترل

در این مرحله هریک از نانوربات‌های زیستی منفرد، باید با یکدیگر برای گسترش آتی مجموعه‌های مشابه و یا متفاوت نانوربات‌ها همکاری کنند. این مرحله طراحی، پایه و اساس مفهوم اجتماع نانوزیستی را مطرح می‌کند. هدف این مرحله، کنترل و برنامه‌ریزی مجموعه‌های نانوزیستی است. همچنین، طراحی گروه‌هایی از ربات‌های نانوزیستی که قادر به اجرای کارهای پیچیده، محاسبات و تشریک مساعی در میان گروه‌ها هستند، مورد بررسی قرار می‌گیرد.

مرحله ۴: ساخت خودکار و ماشین‌های پردازش اطلاعات

برای انجام عملیات پیچیده مانند دریافت، علامت‌دهی و ذخیره‌سازی، اجتماعی از گروه‌های نانوربات زیستی باید ایجاد شود. این مرحله طراحی، شامل ارایه روش‌های ساخت خودکار از ربات‌های نانوزیستی در بافت زنده و بافت مصنوعی (آزمایشگاه) می‌باشد. توانایی پردازش اطلاعاتی که شامل یادگیری و قابلیت تصمیم‌گیری است، نکته کلیدی در این مرحله خواهد بود. این ویژگی، گروه‌های زیستی را قادر به داشتن توانایی خودنمایی بر اساس محیط مقصد می‌سازد. این گروه‌ها می‌توانند برای جستجوی منابع انرژی فرعی برنامه‌ریزی شده و توانایی انطباق با هر منبعی را داشته باشند. مدیریت انرژی، خودترمیمی و نمو، برخی از مشخصات این گروه‌ها می‌باشد.

۵- روش‌های محاسباتی در طراحی نانوربات‌های زیستی

تکنیک‌های مدل‌سازی مولکولی به‌طور هم‌گام با انجام آزمایش‌های گسترده، پایه طراحی سیستم‌های نانوزیستی را شکل می‌دهند [۱۷-۱۶]. همان‌طورکه در نقشه اصلی طراحی ذکر شد، در ابتدا اجزای نانوزیستی مختلف طراحی شده و سپس عناصر عملیاتی در مجاورت یکدیگر قرار گرفته و قابل کنترل و برنامه‌ریزی خواهند بود. برخی از تکنیک‌های مدل‌سازی مولکولی عبارتند از:

۵-۱-روش‌های میدان نیروی تجربی (ماشین‌های مولکولی)

در این روش، از حرکت الکترون‌ها صرف‌نظر شده و انرژی سیستم بر اساس موقعیت هسته در یک پیکربندی مولکولی خاص محاسبه می‌شود. همچنین، در این روش از تقریب بورن-اوپنهایمر استفاده شده و مدل‌سازی اجزای نانوزیستی و یا ترکیبات آن‌ها به‌وسیله یکی از توابع انرژی انجام می‌پذیرد.

۵-۲-روش کمینه‌سازی انرژی

در این روش، انرژی پتانسیل وابسته به مختصات پیکربندی مولکولی

[Downloaded from kiaeee.ir on 2026-11-25]

مطرح شـده و نقاط روی سطح فوقانی (سـطح انرژی پتانسیل) برای محاسـبه مقدار کمینه تابع محاسبه خواهد شد. چنین هندسه‌ای که مطابق کمینه انرژی اسـت، حالت‌های پایـدار پیکربندی مولکولی را شـکل می‌دهد. با ایـن روش، می‌توانیم تغییر پیکربندی سیسـتم از یـک حالت کمینه به حالت دیگر را تحلیل نماییم. تکنیک‌هایی مانند نیوتن- رافسـون و گوسـی- نیوتن برای محاسبه مقادیر کمینه به‌کار می‌رونـد که می‌توانند برای پیش‌بینی ویژگی‌های گوناگون سیسـتم مورد مطالعه به‌کار روند.

۵-۳- روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

بـرای پیش‌بینی کارآیی پویایی (محاسـبه نیـرو و انرژی) یک المان زیسـتی، دینامیـک مولکولی (MD) به‌کار مـی‌رود. این روش، قانون حرکـت نیوتن را در میـان پیکربندی متوالی سیسـتم برای تخمین پویایی آن به‌کار می‌برد. متغیر دیگر دینامیک مولکولی که در صنعت به‌کار گرفته می‌شـود، شبیه‌سـازی مونت-کارلو اسـت کـه از روند تصادفی برای ایجاد پیکربندی مورد نیاز یک سیستم استفاده می‌کند. شبیه‌سـازی‌ها بر اساس محاسـبه میزان انرژی آزاد که در حین گذر از یک حالت پیکربندی به حالت دیگر رها می‌شـود، انجام می‌پذیرد. در MD، سـهولت پیکربندی ویژه از یک مولکول زیسـتی به‌وسـیله محدودیت‌های انرژی انجام می‌شـود؛ بنابراین، باید گذر از یک حالت داده شـده به دیگری حتماً مطلوب باشد، مگر این‌که نیروی جنبشی خارجی وجود داشـته باشـد که به مولکول بـرای غلبه بر محدودیت انرژی کمک نماید.

۵-۴- اتصال مولکولی توابع

روش اتصـال مولکولی برای طراحی سیسـتم‌های نانورباتیک بسـیار مهم اسـت. این روش برای چسباندن دو مولکول به یکدیگر در فضای سه‌بعدی به‌کار می‌رود. روش اتصال مولکولی برای طراحی محاسباتی مجموعه‌های نانوزیسـتی اسـتفاده می‌شـود که الگوریتم‌هایی مانند اتصال، ژنتیک و فاصله هندسه را به‌کار می‌برد. بسیاری از شرکت‌های تولید دارو نیز، الگوریتم‌های جسـتجوی ترکیبی منظم را برای اتصال به‌کار می‌برند. ایـن الگوریتم‌ها کاندیدهای اولیه برای تحقیقات فعلی می‌باشند.

۵-۵-اتصال اجزای نانوزیستی در یک نقطه اتصال

به‌طور خاص دو روند برای طراحی رابط‌های اتصال اجزای نانوزیستی وجـود دارد؛ یک روش، پایگاه داده مولکولی را جسـتجو کرده و یک رابط را بر اسـاس پارامترهای هندسـی انتخـاب می‌کند؛ CAVEAT یک روال سـنتی اسـت که این روش را به‌کار می‌برد. روند دیگر برای طراحی یک رابط از جستجوی اتم به اتم حاصل می‌شود و پارامترهای هندسی که می‌توانند این رابط‌ها را شناسایی کنند، طراحی می‌شوند. سهولت طراحی این رابط‌ها در دنیای واقعی، یکی از چالش‌هایی است که مدل‌های مولکولی با آن مواجه می‌شوند. مقیاس انرژی کمینه که توسـط شبیه‌سازی مونت-کارلو به‌کار می‌رود، روش مستحکمی برای انتخاب سـاختار پایه رابط‌های نهایی است. الگوریتم ژنتیک نیز برای ایجاد چنین طراحی‌هایی به‌کار می‌رود.

۶- روش‌های آزمایشی در طراحی نانوربات‌های زیستی

همان‌طورکه اشـاره شـد، مرحله (۱) در روند طراحی ارایه‌شـده نیاز به یک کتابخانه از اجزای زیسـتی دارد که بر اسـاس پتانسیل آن‌ها، طراحی و گسـترش نانوربات‌ها توصیف می‌شود. تکنیک‌های مولکولی متفـاوت می‌تواند برای ارزیابی کارآیی و سـودمندی اجزای زیسـتی به‌کار رود [۱۶و۷]. برای گسـترش یک نانوربات، به اطلاعاتی از قبیل سـاختار اجزای زیسـتی، درجه تغییر تطابقی هر عنصـر و راهنمای محیطی که این تغییرات ساختاری را تحمل کند، نیازمندیم. بر اساس روش‌های محاسـباتی که در بخش قبل توضیح داده شد، تکنیک‌های آزمایشی نیز برای به‌دست آوردن این اطلاعات به‌کار می‌رود. برخی از این تکنیک‌ها در ادامه آورده شده‌است:

۶-۱- طیف‌سنجی رنگ‌تابی دورانی (CD)

طیف‌سـنجی CD می‌تواند برای به‌دسـت آوردن سـاختار درونی هر مولکول زیسـتی بـه‌کار رود. در این تکنیک، اشـعه مـاورای بنفش قطبی‌شده برای کاوش توسعه شکل‌گیری ساختار ثانویه در راه‌حل‌ها به‌کار می‌رود. این تکنیک، یک روش اثبات‌شـده برای تخمین ترکیب سـاختاری از عناصـر نانورباتیک در هنـگام تغییـر در موقعیت‌های محیطی را نشان می‌دهد.

۶-۲- انتقال انرژی رزونانسی فورستر (FRET)

این تکنیک، برای افزایش کاوش توسـعه تغییرات تطابقی به‌وسـیله عناصـر نانورباتیک به‌کار می‌رود. در این روش، اجزای نانورباتیک باید طوری مهندسی شوند که cystein در هر دو سر آن‌ها باقی بماند. یک سر جزء زیستی به‌عنوان اهدا کننده مولکول رنگ‌شده و سر دیگر نیز به‌عنوان پذیرنده مولکول رنگ‌شـده، برچسـب‌گذاری می‌شود. نتیجه سـیگنال FRET می‌تواند با لیـزر طوری پالایش شـود که تغییرات سیگنال، به فضای مابین دو سر یک جزء زیستی وابسته باشد.

۶-۳- رزونانس (تشدید) مغناطیسی هسته‌ای (NMR)

این تکنیک، برای تعیین سـاختار سـه‌بعدی دقیق اجزای نانورباتیک به‌کار می‌رود. اگرچه طیف‌سنجی CD می‌تواند برای تخمین تغییرات موجود در ترکیبات ساختاری اجزای زیستی به‌کار رود، اما پیکربندی سـه‌بعدی دقیق را مشـخص نمی‌کند. این اطلاعات می‌تواند توسـط طیف‌سـنجی NMR و برچسـب‌گذاری جزء زیسـتی با اتم‌های فعال NMR به‌دسـت آید. به‌علاوه، برای تعیین ساختارهای پایانی اجزا نیز، NMR می‌تواند برای درک جنبش‌شناسـی تغییرات ترکیبی مولکول زیستی در زمان واقعی استفاده شود.

۶-۴- انبرک نوری لیزری (LBOT) و فلوئورسانس تک‌مولکولی

LBOT و فلوئورسـانس تک‌مولکولی می‌تواند بـرای تعیین نیروهای به‌کار رفته در عناصر نانورباتیک و تغییر ساختاری که در حین پیدایش این نیروها، بعد از آشکارسازی محرک‌های مختلف رخ می‌دهد، به‌کار رود. LBOT می‌توانـد نتایـج نیرو و جابه‌جایی را با اسـتفاده از روش Sub-PicoNewton و تقریـب یـک نانومتری فراهـم کند. همچنین اندازه‌گیری‌های فلوئورسـانس تک‌مولکولی می‌تواند بر اسـاس روش FRET، اطلاعات موردنیاز حالت ساختاری هر مولکول در هر نقطه از منحنی جابه‌جایی- نیرو را محاسبه کند.

برای هم‌بسـتگی اندازه‌گیری‌های نیرو با تغییرات سـاختاری، ترکیب روش‌های LBOT و FRET مورد نیاز است.

۷- نتیجه‌گیری

یکی از مهم‌ترین شـاخه‌های دانش نانوفناوری که امروزه بسیار مورد توجه قرار گرفته، نانورباتیک اسـت که این علم شامل طراحی، کنترل و برنامه‌نویسی ربات‌ها در مقیاس نانو می‌باشد. نانوربات‌ها ماشین‌های کوچکی هسـتند که برای انجام عملیاتی خاص و تکرارشونده با دقت بسـیار بالا طراحی می‌شـوند. این ریزماشـین‌های هوشـمند قادرند چندین نسـخه از خودشان تهیه کرده و جایگزین بافت‌های فرسوده و آسـیب‌دیده نمایند. در این مقاله به بررسی طراحی و مشخصه‌سازی

ادامه در صفحه ۵۳

[Downloaded from kiaeee.ir on 2026-11-25]