

Mallinnus avaa

Jään salaisuuksia

■ **Laskennallinen mallinnus on paljastanut tutkijoille aivan uusia veden ja jään ominaisuuksia. Aalto-yliopiston ryhmä selvitti sen avulla jääkuutioarvoituksen, jota tiedeyhteisö oli pähkäillyt yli puolitoista vuosisataa.**

Jari Koponen

Lanka, jonka päissä on painot, kulkee jääkuution läpi sitä kuitenkaan halkaisematta. Kuinka ihmeessä se on mahdollista?

Koe esitettiin vuonna 1860, josta lähtien tutkijat eri puolilla maailmaa ovat pohtineet ilmiön salaisuutta.

Nyt yli 150 vuoden pätkäily on vihdoinkin ohi. Arvoituksen ratkaisi Aalto-yliopiston professorin **Tapio Ala-Nissilän** vetämä tutkijaryhmä.

Otaniemeläistutkijat selvittivät ilmiön toiminnan atomitasolla kiitos uuden, kolmiulotteisen MB (Mercedes-Benz) -simulointiohjelman, jonka Ala-Nissilän ryhmä kehitti yhteistyössä professorien **Adam Fosterin** ja **Mikko Karttusen** tutkimusryhmien kanssa.

Simuloinnissa tutkijat asettivat jään päälle nanolangan. Lankaan kohdistuvan tietyn, vähäisen rajavoiman jälkeen lanka alkaa kulkeutua jään läpi. Sen saavat aikaan jääpinnan epäjärjestäytyneisyys ja langan aiheuttama paine, jotka sulattavat jäätä.

Jatko riippuu siitä, onko lanka hydrofiilinen vai hydrofobinen.

Hydrofiilisen eli vesihakuisen langan koko pinta kostuu pienestäkin vesimäärästä, ja sulanut vesi pääsee kulkemaan langan ohi. Sen jälkeen se jäätyy uudestaan langan yläpuolella. Langan liike on jatkuvaa ja tasaista.

Vettä hylkivä hydrofobinen lanka taas muodostaa eteensä suuren sulaveden alueen, sillä vesimolekyylit pyrkivät välttämään pintaa mah-

dollisimman kauan. Lanka liikkuu tämänkin vaiheen aikana, joten langan yläpuolelle muodostuu tyhjä jäätön alue.

Lopulta vesi ohittaa langan purskahduksenomaisesti, täyttää tyhjän tilan ja jäätyy. Tapahtumaketju uusiutuu, joten langan liikkuminen tapahtuu nykyksittain.

Monimuotoinen kitka

H₂O on bruttokaavaltaan yksinkertaisimpia molekyyliä, mitä olla voi. Ominaisuuksiltaan vesi on kuitenkin kaikkea muuta kuin yksinkertainen. Veden ominaisuuksien laskennallinen mallintaminen on siksi hyvin hankalaa, ja sama koskee veden kiinteää muotoa jäätä.

Tutkijat ovat kehittäneet lukuisia, eri lähtökohdista rakennettuja malleja, joiden laskennallinen raskaus eli tarvittavan tietokonekapasiteetin tarve vaihtelee. Kulloinkin käytettävä malli joudutaan valitsemaan kohteen mukaan, sillä kaikkiin tapauksiin sovellettavia malleja ei ole.

Jään pinnan keskeinen ominaisuus on sen liukkaus. Sen selittämisessä joudutaan tekemisiin kitkan kanssa, johon Ala-Nissilän ryhmä on paneutunut pitkään.

”Kitka on hyvin monimutkainen ilmiö. Ei ole olemassa yleiskäyttöistä teoriaa kitkasta, vaan tilanteet täytyy tutkia tapauskohtaisesti”, Ala-Nissilä kertoo.

Ryhmä on viimeksi selvittänyt kitkan vaikutusta kahden toistensa suhteen liikkuvan jääpinnan tapauksessa. Tutkimus on ensimmäinen tilanteesta tehty atomitaso simulaatio.

Jään pinta on luonnostaan epäjärjestynyt, sillä jään säännöllinen kiderakenne rikkoutuu pinnalla. Tällöin pintamolekyylit ovat heikommin sitoutuneita, ja niillä on suurempi liikkuvuus.

Ryhmä selvitti, kuinka lämpötila, paine ja pintojen liikenopeus vaikuttavat pintojen välille syntyvään epä-

järjestäytyneen tai sulan kerroksen paksuuteen. Tämä puolestaan vaikuttaa systeemissä vallitsevaan kitkaan.

Simulaatiota vastaava käytännön tilanne on jäätiköissä, joiden jää on taipuisaa ja kerroksellista. Kerrokset voivat liikkua toistensa suhteen. Jäätikön pohjassa taas tapahtuu painesulamista, joka omalta osaltaan liikuttaa jäätikköä.

”Jäätiköiden osalta täytyy ottaa huomioon monia muitakin tekijöitä. Jään rakenne riippuu siitä, miten syvällä ollaan. Jäässä on epäpuhtauksia ja halkeamia, joilla on oma vaikutuksensa. Me olemme kuitenkin tutkineet vain ilmiöön liittyvää perusfysiikkaa”, Ala-Nissilä korostaa.

Myös jääpintojen kitkatutkimukseen vaadittiin suomalaistutkijoiden kehittämää kolmiulotteista MB-ohjelmaa. Aiempi, jo 1970-luvulla rakennettu kaksikulotteinen MB on laskennallisesti kevyempi ja yksinkertaisempi ohjelma, jolla kuitenkin on rajoituksensa.

Kolmiulotteisen ohjelman avulla kyetään mallintamaan kvalitatiivisesti esimerkiksi sellaisia veden termodynaamisia anomaliaita kuin neljän celsiusasteen tiheysmaksimi ja suuri lämpökapasiteetti. Ohjelma tuottaa tutkitusti myös jäälle oikeanlaisen rakenteen.

Luistelun optimit

Malliesimerkinä paineen aiheuttamasta jään sulamisesta käytettiin pitkään luistelua. Selitystä näkee joskus käytettävän vielä nykyäänkin.

Totuus on kuitenkin toisenlainen, Tapio Ala-Nissilä huomauttaa.

”On varsin helppoa laskea, että 90 kilon painoisen luistelijan vaikutus lämpötilan nousemisen luistimen terän alla on vain vajaat kaksi astetta.”

”Sen sijaan vesikerroksen muodostumiseen vaikuttavat pääosin kaksi



Taitoluistelussa jään ihanteellinen lämpötila on tutkitusti $-5,5$ celsiusastetta. Siinä jäinen parketti on liukkaimmillaan myös Henna Lindholmin ja Ossi Kanervon tanssia.

Olli-Pekka Juhola

©op@ki



muuta tekijää: kitka ja jään pintarakenne.”

Tärkein tekijä on luistelijan potkusta energiansaava liukumakitka. Toisaalta jään vapaa pinta ei ole täysin kiinteä, vaan siinä on luonnostaan epäjärjestystä, joka auttaa kitkasulamista.

”Yli 25 pakkasasteessa epäjärjestyskerros jähmettyy, jolloin kitka kasvaa voimakkaasti. Seurauksena on huonempi luisto. Samoin, jos luistelija pysähtyy, on noissa pakkasasteissa liikkeellelähtö jo selvästi hankalampaa.”

Eri luistelulajeille onkin omat optimaalämpötilansa.

”Taitoluistelu sujuu parhaiten viidessä ja puolessa pakkasasteessa, kun taas jääkiekkoiluun sopivin on yhdeksän pakkasastetta.”

Huikeat näkymät

Ihmiselimistön laskostuneet proteiinit menettävät biologisen toimintakykynsä, mikäli lämpötila on liian korkea tai matala.

Denaturaatioksi kutsutun prosessin voi nähdä esimerkiksi kananmunia keitettäessä. Munan hyytelämäinen valkuaisaine, joka on pääosin albumiinia, muuttuu keitettäessä valkeaksi kiinteäksi aineeksi. Kyse on tällöin kuumadenaturoinnista, joka ymmärretään ilmiönä varsin hyvin.

Kylmädenaturointiin sen sijaan liittyy vielä monia epäselviä asioita. Nyt siitäkin tiedetään aiempaa enemmän, sillä yhteistyössä Tampereen teknillisen yliopiston kanssa Ala-Nissilän ryhmä on mallintanut

”Ohjelmat jyräävät ideat”

Tieteen ja sen sovellusten suomalaisessa rahoitusjärjestelmässä on viime vuosina koettu suuria murallistuksia. Pääsuuntauksena on ollut keskittämisen ja kontrolloinnin lisäys. Professori **Tapio Ala-Nissilän** mukaan tämä näkyy tutkijan työssä selvästi.

”Muutokset ovat johtaneet siihen, että enää ei rahoiteta tutkijoiden ideoita vaan ohjelmia”, Ala-Nissilä sanoo.

”Tämä koskee erityisesti Tekeä. Aiemmin jos tutkijalla oli hyvä idea ja sen soveltamisesta kiinnostuneita tahoja, Tekesistä oli mahdollisuus saada rahoitusta.”

”Nykyään Tekes rahoittaa omia, ennalta määrättyjä ohjelmiaan. Jos ideasi ei sovi ohjelmiin, et myöskään saa rahaa. Sama koskee suurelta osin myös Suomen Akatemian rahoitusta.”

Ala-Nissilällä on asiasta oma kohtaista kokemusta.

”Haluaisimme esimerkiksi mallintaa kumin ja jään välistä vuorovaikutusta. Se linkittyisi kokeelliseen työhön renkaiden kanssa, jota myös tehdään Aalto-yliopistossa. Mutta kun ei ole ohjelmaa, johon tällainen työ sopisi, ei tule rahoitustakaan.”

Professori kantaa huolta tutkimuksen vapaudesta.

”On surullista, että Suomessa on päädytty kuristamaan vapaata tutkimusta. Eivät uudet hyvät ideat tule ohjelmista, ne tulevat tutkijayhteisöstä.”

myös kylmädenaturoatiota.

Mallinnus osoitti, että ilmiön takana on kaksi tekijää.

Niistä ensimmäinen on hydrofobia eli proteiinien taipumus hylkiä vesimolekyyleja. Toinen on proteiinien lähellä olevien vesimolekyyliden järjestyntymisen ja veden rakenteen muutokset lämpötilan laskiessa.

Tekijöiden avulla voidaan selittää esimerkiksi se yllättävä havainto, että kun lämpödenaturointi sitoo lämpöä, kylmädenaturoinnissa lämpöä päinvastoin vapautuu.

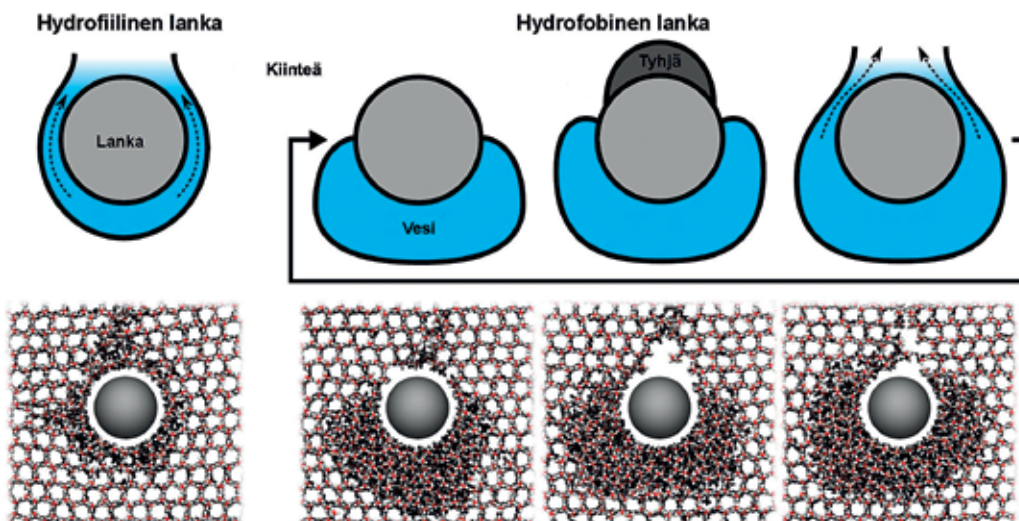
Mallinnus oli tuloksekas, vaikka käytetty proteiinimalli oli äärimmäisen yksinkertainen.

”Oikeiden proteiinien mallit ovat erittäin monimutkaisia, ja niiden käyttö tulisi laskennallisesti liian raskaaksi”, Ala-Nissilä selventää.

Jos ja kun myös mutkikkaampi mallinnus jatkossa onnistuu, tutkimus saattaa tarjota aivan uusia mahdollisuuksia sen soveltajille.

”Ehkä löytyy keinoja, joilla voidaan vaikuttaa kemiallisesti veden rakenteeseen ja sitä kautta proteiineihin. Tätä kautta voi aueta huikeita näkymiä diagnostiikkaan ja uusiin hoitomuotoihin.” □

Kirjoittaja on kemisti ja vapaa toimittaja.



Nanolangan kulkeutuminen jään läpi, ylempänä kaavioesityksenä ja alempana mallinnuskuvina. Mallinnuksessa jää näkyy säännöllisenä kuusikulmioista muodostuvana rakenteena ja vesi säännöttömänä molekyylimassana.



Scanstockphoto

Vesi on elämän ehto

Vesimolekyylien perusominaisuus on niiden dipoliluonne. Hapella on negatiivista ja vedyillä positiivista varausta.

Vesimolekyylit voivat siksi muodostaa keskenään vetysidoksia. Hetkellisiä muutaman molekyylin käsittäviä sidosryhmiä syntyy ja purkautuu jatkuvasti.

Vetysidoksista johtuvat monet veden erikoiset ominaisuudet, kuten se, että veden tiheysmaksimi on neljässä asteessa. Luonnonvedet eivät siten jäädy pohjia myöten.

Vedellä on myös kohtalaisen korkea kiehumislämpötila eli 100

celsiusastetta, ja sitä myöten myös korkea höyrystyslämpö. Tämän ansiosta trooppisilla merialueilla tapahtuva haihdunta sitoo suuret määrät lämpöä. Kun höyry kulkeutuu pohjoisille alueille, se tiivistyy vedeksi, ja lämpöä vapautuu.

Ilmiö tasaa maapallon lämpötilaa ja pitää sitä elämälle suotuisana. Samalla tavoin tasalämpöisillä eläimillä veden haihtuminen elimistöstä vakioi niiden lämpötilaa.

Myös veden korkea ominaislämpökapasiteetti – eli sen kyky varastoida tai luovuttaa suuria määriä lämpöä suhteellisen pientä lämpö-

Ilman vettä planeetallamme ei olisi elämää – eikä edes elämän mahdollisuutta.

tilan muutosta vastaan – voi tasata paikallisen ilmaston lämpötilaa.

Elämän kannalta veden tärkein ominaisuus on sen toimiminen liuottimena. Osmoosi eli veden ja siihen liuenneiden aineiden kulku solukalvon läpi säätelee näiden aineiden pitoisuutta solun sisällä. Tämä on välttämätön toiminto solujen elinkyvyille ja aineenvaihdunnalle.

Lisäksi vesimolekyylit osallistuvat elimistön tuottamien proteiinien laskostumiseen, joka tarvitaan, jotta proteiinit olisivat biologisesti toiminnallisia.