

ДӘРИСТІҢ ҚЫСҚА СИПАТТАМАСЫ

№2 дәріс: Супрамолекулалық химияның іргелі аспектілері

Дәріс мақсаты: Супрамолекулалық химияның негізін қалайтын түсініктерді айқындау және іргелі аспектісін талқылау.

Жалпы алғанда, өздігінен құрастыруды статикалық өздігінен құрастыру және динамикалық өздігінен құрастыру деп жіктеуге болады. Статикалық өзін-өзі құрастыруда реттелген күй жүйе тепе-теңдікке жақындаған кезде қалыптасады, оның бос энергиясын азайтады, ал динамикалық өздігінен құрастыруда бұрыннан бар компоненттердің үлгілері белгілі бір жергілікті өзара әрекеттесу арқылы ұйымдастырылады. Байланысты пәндер динамикалық өздігінен құрастырылған үлгілерді «өзін-өзі құрастырылған» емес, «өзін-өзі ұйымдастырған» ретінде сипаттайды. Динамикалық өзара әрекеттесулердің, әсіресе биологиялық өздігінен құрастырылған жүйелерде туындаған үлкен қызығушылыққа қарамастан, қолданбалы зерттеулердің көпшілігі әлі де статикалық типтегі құрылымдарға бағытталған. 2D және 3D нанокұрылымды материалдар мен химиялық тәсілдерді қолданатын құрылғылар сияқты жетілдірілген материалдар әдетте әлсіз ковалентті емес өзара әрекеттесу арқылы молекулалық өздігінен құрастыруды және қатты беттермен күшті химиялық байланыстар арқылы молекулалардың бағытталған құрастыруын қамтиды. Осы құрастыру әдістерінің екеуі де, әсіресе қатты беттердегі органикалық молекулалардың әдістері, молекулалық электронды құрылғыларды, биомолекулалық тану микросхемаларын, трибологияны, коррозияны тежеуді және 3D наноүлгілеуді қоса алғанда, перспективалы қолданбалардың кең спектрі үшін маңызды негіз болып табылады. Синтез стратегиясы ретінде өзін-өзі құрастыруға назар аудару негізінен молекулалармен шектелді, өйткені химиктер молекулалық масштабта материяның құрылымын басқарумен кәсіби түрде айналысады. Химияның биологиямен және материалтанумен байланысының кеңейуі және технологияның нанометрлік және микрометрлік құрылымдарға бағытталуы бұл фокусты молекуладан үлкенірек масштабтағы заттарды қамту үшін кеңейте бастады. Қазір өзін-өзі құрастыру маңызды болып табылатын құрамдас бөліктердің өлшемдерінің үш диапазоны бар: молекулалық, нанокөлемді (коллоидтар, нано сымдар және наносфералар және олармен байланысты құрылымдар) және мезоскопиялықтан макроскопиялыққа дейін (өлшемдері микроннан сантиметрге дейінгі нысандар). Осы диапазондардың әрқайсысында өздігінен құрастыру ережелері ұқсас, бірақ бірдей емес. Өздігінен құрастыру ұғымдары тарихи түрде молекулалық процестерді зерттеу нәтижесінде пайда болды. Молекулярлық жүйеде өзін-өзі жинаудың сәттілігі жүйенің өрт сипаттамаларымен анықталады.

(i) Құрамдас бөліктер: Өздігінен жиналатын жүйе бір-бірімен әрекеттесетін молекулалар тобынан немесе макромолекула сегменттерінен тұрады. Бұл молекулалар немесе молекулалық сегменттер бірдей немесе әртүрлі болуы мүмкін. Олардың өзара әрекеттесуі біршама реттелген күйден (ерітінді, ретсіз агрегат немесе кездейсоқ катушка) реттелген соңғы күйге (кристалдық немесе бүктелген макромолекула) әкеледі.

(ii) Өзара әрекеттесулер: Өздігінен құрастыру молекулалар бір-бірімен тартымды және итеруші әсерлесу тепе-теңдігі арқылы әрекеттескенде пайда болады. Бұл өзара

әрекеттесулер әдетте әлсіз (яғни, жылу энергиясымен салыстыруға болады) және ковалентті емес (ван-дер-Ваальс пен Кулондық өзара әрекеттесу, гидрофобты өзара әрекеттесу және сутектік байланыстар), бірақ салыстырмалы түрде әлсіз коваленттік байланыстар (координациялық байланыстар) өзін-өзі құрастыру үшін көбірек сәйкес келеді. Өздігінен құрастырылатын құрамдас бөліктердің фигураларының бірін-бірі толықтыруы да өте маңызды.

(iii) Қайтымдылық: реттелген құрылымдарды жасау үшін өздігінен құрастыру үшін бірлестік не қайтымды болуы керек немесе құрамдас бөліктерге агрегаттың өзі құрылғаннан кейін өз орындарын реттеуге мүмкіндік беруі керек. Компоненттер арасындағы байланыстардың күші, сондықтан оларды бұзуға бейім күштермен салыстырмалы болуы керек. Молекулалар үшін күштер жылулық қозғалыс арқылы пайда болады. Молекулалардың соқтығысуы қайтымсыз жабысуға әкелетін процестер кристалдарды емес, әйнектерді тудырады.

(iv) Қоршаған орта: Әдетте, молекулалардың өздігінен жиналуы компоненттердің қажетті қозғалысын қамтамасыз ету үшін ерітіндіде немесе интерфейсте жүзеге асырылады. Компоненттердің қоршаған ортамен әрекеттесуі процестің жүруіне қатты әсер етуі мүмкін.

(v) Жаппай тасымалдау және араластыру: өздігінен жиналуы үшін молекулалар қозғалмалы болуы керек. Ерітіндіде жылулық қозғалыс молекулаларды жанасу үшін қажетті қозғалыстың негізгі бөлігін қамтамасыз етеді.