

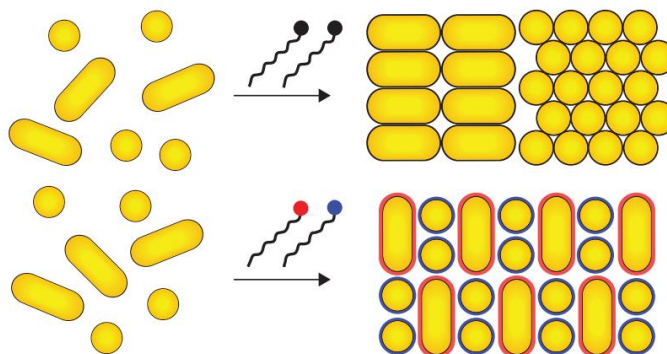
## ДӘРИСТІҢ ҚЫСҚА СИПАТТАМАСЫ

**№3 дәріс:** Ковалентсіз байланыс арқылы өздігінен құрастырылатын химия

**Дәріс мақсаты:** Өздігінен құрастырылатын химия негізінде түзілетін наноматериалдардың ковалентті байланысу жолдарын мысалдар арқылы талқылау.

Нанотехнологияның күтілетін қосымшаларының көпшілігі жеке нано-нысандарға емес, осы нано-нысандар бір-бірімен өзара әрекеттесетін және өздерін мақсатты түрде ұйымдастыратын жиындарға негізделген. Наноғылымның алдында тұрған міндет нанокөпінше компоненттерді жинаудың тиімді және сенімді жолдарын әзірлеу болып табылады. Өзін-өзі құрастыру - бұл тапсырма үшін ең перспективалы үміткер. Көрнекі мысал ретінде жеке бөлшектердің жоғары дәрежелі құрылымдарға наноөлшемді өздігінен жиналуы (1-сурет) материалдық бөлшектер арасындағы «дене» күштерінен басқа (мысалы, Вандер Уолл немесе магниттік өзара әрекеттесулер) наносөлшемді шарлар мен таяқшалар арасындағы өзара әрекеттесулерді көрсетеді. тиісті беттік функцияландыру арқылы реттелуі керек.

Наноөлшемді құрамдастардың өзара әрекеттесулері олардан алынған молекулалық өзара әрекеттесулерден айтарлықтай ерекшеленеді. Берілген өзара әрекеттесудің өздігінен құрастыруды индукциялау қабілеті оның шамасы мен ұзындық шкаласына байланысты. Сонымен қатар, өзара әрекеттесетін бөлшектердің өлшеміне қатысты әрекеттесу ауқымы бұл бөлшектердің реттелген құрылымға немесе аморфты фазаға жиналатынын немесе жиналмайтынын анықтай алады. Жалпы тартымды әрекеттесулер (мысалы, vdW күштері) молекулалық өлшемдерге айтарлықтай әсер етеді. Бұл күштерді өздігінен құрастыруда қолдану үшін молекулалық ұзындық шкаласынан (3–10Å) бірнеше-ондаған есе үлкен наноскопиялық компоненттерді (~2-30 нм) пайдалану қажет.



### *Өзін-өзі құрастырудағы ұзақ мерзімді күштер*

Өздігінен құрастыру молекулалар бір-бірімен тартымды және итеруші әсерлесу тепе-теңдігі арқылы әрекеттескенде пайда болады. Бұл өзара әрекеттесулер әдетте әлсіз (яғни, жылу энергиясы бойынша) және ковалентті емес (ван-дер-Ваальс пен кулондық өзара әрекеттесу, гидрофобты өзара әрекеттесу және сутегі байланыстары), бірақ салыстырмалы түрде әлсіз коваленттік байланыстар (координациялық байланыстар), электростатикалық және магниттік өзара әрекеттесулер барған сайын танылады. өздігінен құрастыру үшін қолайлы. Сонымен қатар, өздігінен құрастырылатын құрамдас бөліктер арасындағы пішіндердің (Лего химиясы) толықтырылуы да маңызды.

а. Ван дер Ваальс (vdW) Ван дер Ваальс әрекеттесу атомдардың, молекулалардың және сусымалы материалдардың барлық түрлерінің ішіндегі оң және теріс зарядтардың үздіксіз қозғалысына байланысты электромагниттік тербелістерден туындайды. Сондықтан олар кез келген екі материалдық дененің арасында болады, әдетте денелерді біріктіру үшін тартымды әрекет етеді. Бұл тартымды өзара әрекеттесулердің шамасы тіпті наноскопиялық құрамдастардың арасында айтарлықтай болуы мүмкін – кТ-дан бірнеше жүздеген есе үлкен. Осыған байланысты ван дер Ваальс күштері көбінесе ерітіндіден нанобөлшектердің қалаусыз тұнбасын тудыратын жағымсыз әсер деп саналады. Дегенмен, тұрақтандырғыш лигандтарды немесе тиісті еріткіштерді пайдалану арқылы ван дер Ваальс әрекеттесулерін өздігінен құрастыру процестерін басқару үшін пайдалы құралды қамтамасыз ету үшін басқаруға болады. Өздігінен құрастырылған нанокұрылымдардың кейбір мысалдары суреттелген. Осы мысалдардың әрқайсысында спецификалық молекулалық өзара әрекеттесу әлдеқайда үлкен құрамдас бөліктер арасында маңызды және жиі арнайы бөлшектер аралық потенциалдарды тудырады және олардың әртүрлі реттелген тәртіпте өздігінен ұйымдастырылуына мүмкіндік береді.

б. Электростатикалық өзара әрекеттесу Ван дер Ваальс күштері сияқты дерлік электростатикалық әрекеттесу иондық, коллоидтық және тіпті макробөлшектік кристалдардың түзілуіне негіз береді және жақында алмаз тәрізді NP кристалдары сияқты әртүрлі бірегей құрылымдарды қалыптастыру үшін наноөлшемде қолданылды. және берік моноқабатты немесе көп қабатты жабындар. Табиғаты бойынша ең алдымен тартымды болып табылатын ван-дер-Ваальс әрекеттесулерінен айырмашылығы, электростатикалық әрекеттесу тартымды (ұқсас зарядталған бөлшектер арасында) немесе итеруші (қарсы зарядталған бөлшектер арасында) және тіптен бағытталған болуы мүмкін, мысалы, зарядтардың беттік таралуы симметриялы емес бөлшектерде немесе тұрақты электрлік поляризация. Сонымен қатар, осы электростатикалық өзара әрекеттесулердің шамасы мен ұзындық шкаласын еріткіш таңдау (мысалы, диэлектрлік өтімділік), сондай-ақ қоршаған қарсы иондардың концентрациясы мен химиялық табиғаты (мысалы, өлшемі мен валенттілігі) арқылы бақыланатын түрде реттеуге болады. Осы бірегей атрибуттардың арқасында электростатикалық әсерлесулер ерітіндідегі бөлшектерді тұрақтандыру үшін де, олардың екілік қондырмаларға өздігінен жиналуын бағыттау үшін де пайдалы. Наноөлшемді бөлшектегі электростатикалық заряд негізінен беттік әсер екенін атап өту керек, мысалы, иондық түрлердің адсорбциясы немесе десорбциясы арқылы. Демек, ол бөлшектердің көлемдері арасында әрекет ететін қосымша бөлшектер аралық күштердің болуын жоққа шығармайды. Ван дер Ваальс күштерінен басқа, тұрақты электрлік немесе магниттік поляризациясы бар материалдар арасында басқа да «дене» күштері пайда болады. Дегенмен, электрлік поляризацияланған бөлшектердің бірнеше қызықты мысалдарына карамастан (мысалы, CdSe бөлшектері немесе басқа жартылай өткізгіштер), бұл күштер әдетте әлсіз және электролит ерітінділерінде скринингке жатады.

