

## ДӘРИСТІҢ ҚЫСҚА СИПАТТАМАСЫ

**№5 дәріс:** Өздігінен құрастырылатын химияда қолданылатын синтез стратегиялары

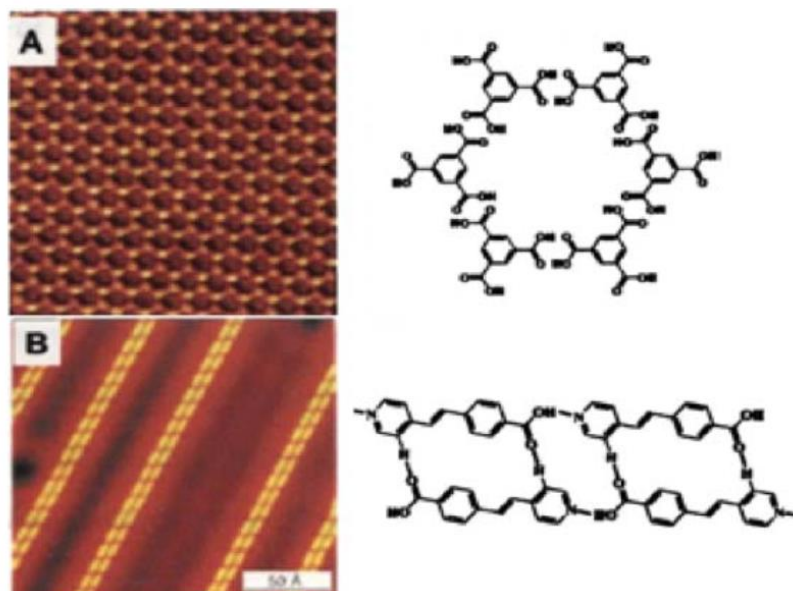
**Дәріс мақсаты:** Өздігінен құрастырылатын химияның негізгі синтездеу стратегияларын талқылау.

Өздігінен құрастырылған наноөлшемді материалдар мен құрылғылардың синтезі наноөлшемге қатысты әртүрлі беттік химиямен анықталады. Бұл жинақтар молекулярлық немесе атомдық масштабтағы фазааралық ковалентті емес әрекеттесулерден және/немесе беттік химиялық реакциялардан туындайды. Осы әдістер мен қолданбаларға қатысатын беттік химия наноөлшемді беттік химия деп аталады. Молекулалық синтез - химиктер атомдар арасында коваленттік байланыстар құру арқылы молекулалар жасау үшін қолданатын технология. Молекулярлық өздігінен құрастыру – молекулалардың (немесе молекулалардың бөліктері) өздігінен реттелген агрегаттарды құрайтын және адамның араласуынсыз болатын процесс; қатысатын өзара әрекеттесу әдетте ковалентті емес. Молекулалық өздігінен құрастыруда молекулалық құрылым жинақтың құрылымын анықтайды. Синтез молекулаларды құрайды; өздігінен құрастыру молекулалардың реттелген ансамбльдерін (немесе макромолекулалардың реттелген формаларын) жасайды. Молекулалық өзін-өзі құрастыру кезінде пайда болған құрылымдар әдетте тепе-теңдік күйде болады (немесе кем дегенде метастабильді күйде). Өзін-өзі құрастырудың жаңалығы 100 нм-ден аз масштабта ұтымды құрылымдалған материяның қалыптасуына назар аударады және бұл құрылымдарға қол жеткізудің жалғыз практикалық әдісі құрамдас бөліктерді жинау болып табылады. Молекулярлық өзін-өзі құрастыруға келесі үш жалпы тәсілді қолдану арқылы қол жеткізуге болады:

- Физиосорбция арқылы өздігінен құрастыру (өрнекті органикалық моноқабаттар)
- Хемосорбция арқылы өздігінен құрастыру
- Металл иондарымен лигандтардың әрекеттесулері арқылы өздігінен құрастыру

### *Физиосорбция (органикалық моноқабаттар)*

Молекулалардың физиосорбциясы өздігінен құрастыру арқылы өрнекті моноқабаттардың түзілуін қамтиды. Молекулалар салыстырмалы түрде әлсіз ван-дер-Ваальс әрекеттесулері және адсорбаттың бетпен ықтимал электрондық әрекеттесулері арқылы бетіне адсорбцияланады. Молекулалық жинақтың жалпы құрылымы мен тұрақтылығы анықталады сутегі байланысы, координаттық байланыс, хост пен қонақ әрекеттесуі және т.б. сияқты әртүрлі молекулааралық өзара әрекеттесу арқылы. Мысалы, тримез қышқылы және құрылымдық байланысқан қосылыстар Cu (111) және графит беттеріндегі сутегі байланысы арқылы алтыбұрышты желілерді (розеткалық құрылымдар) құрайды (1-сурет). Сол сияқты, 4-[транс-2-(пирид-4-ил-винил)]бензой қышқылы пиридил және бензой қышқылы бөліктері арасындағы сутектік байланыс арқылы молекулалық сымдарды құрайды.

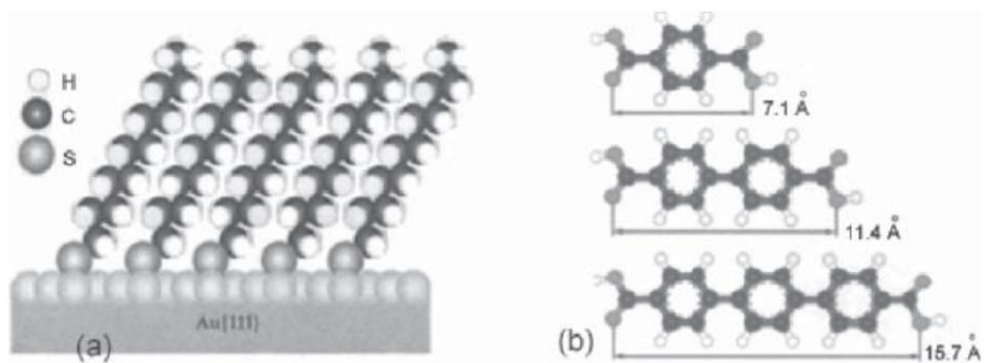


### *Хемосорбция*

Мыс және алтын сияқты өтпелі металдардағы электронға бай бас топтары бар (мысалы, S, O, N) беттік-активті заттардың хемосорбциясы беттерде молекулалардың өздігінен жиналуының кеңінен қолданылатын әдістерінің бірі болып табылады. Құрастыру беттер мен бас топ арасындағы полярлық коваленттік немесе иондық байланыстар арқылы және одан әрі іргелес молекулалар арасындағы қолайлы жанама әсерлесу арқылы нығайды. Au(111) бетіндегі тиол топтарының хемосорбциясы металмен күшті үйлестіру қабілетіне байланысты ең көп зерттелген жүйе болып табылады. Алтын бетіне химиялық сорбцияланған n-алканетиолат молекулаларының SAM схемалық көрінісі 2-суретте көрсетілген. Беткейге химиялық байланысқан молекулалардың болуы фазааралық қасиеттерді (ылғалдану, өткізгіштік, адгезия және химия) өзгертеді, олардан айтарлықтай ерекшеленеді. жалаңаш субстратты және, демек, SAM-тер басты технологиялық қызығушылық тудырады.

### *Металл иондары мен лигандтардың әрекеттесуі*

Металл иондарының орталықтарының органикалық лигандтармен (Льюис негіздері) әрекеттесуі күштірек, бағытталған және селективті байланыстарға әкеледі және координациялық полимерлер мен желілік құрылымдарды дайындау үшін кеңінен қолданылады. Бұл әдіс беттерде металл иондарын ұйымдастырудың тамаша әдісін ұсынады. Металл иондары кішірек өлшемге ие (<1 нм) және олардың қасиеттері лигандтардың түрі мен геометриялық орналасуына байланысты реттелуі мүмкін. Тиісті металл ионының айналасындағы электронды тығыздықтың жергілікті таралуы молекулалық құрылғыларды жобалауда құрылымдық және функционалдық негізді құра алады. Тотығу-тотықсыздану, электронды немесе спин күйлері сияқты үйлестірілген металл иондарының тән қасиеттерін көп күйлі цифрлық ақпаратты сақтау және өңдеу (мысалы, спинтроника) үшін пайдалануға болады. Fe атомдары арасындағы қашықтықты лигандтарды дұрыс таңдау арқылы металл-органикалық координациялық желілер арқылы басқаруға болады. Тиісті ұзындықтағы дикарбон қышқылының туындылары темір атомдары арасындағы аралық элемент ретінде пайдаланылды (3-сурет).



**Figure 6.6** Schematic representation of (a) *n*-dodecanethiolate monolayer, self-assembled on an atomically flat gold substrate. Smith et al. [18], © 2004. With permission of Elsevier; (b) dicarboxylic acid derivatives as spacer. Stepanow et al. [19], © 2006. With permission of ACS.