

САМООРГАНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»
Ст.: М.В. Бондаренко, М.А Пархоменко, А.В. Сергеева,
М.Н. Скорнякова
Рук. доц. В.А. Лыках*

В нанотехнологиях все больше используют процессы самоорганизации молекул, в основе которых лежит то, что всякая система в процессе хаотического теплового движения приходит в состояние с минимумом потенциальной энергии, являющееся наиболее устойчивым. Молекулы, используемые для самоорганизации, должны иметь три основные функциональные группы: "головку", которая избирательно взаимодействует и прикрепляет молекулу к поверхности подложки в химически маркированных местах; "хвостик", обеспечивающий нужные свойства поверхности самоорганизованного слоя, и промежуточную функциональную группу, которая определяет нанoarхитектуру самоорганизованного слоя и характер координации молекул. Температура должна быть достаточной для тепловой миграции молекул по поверхности, в ходе которой и происходит самоорганизация. Подбором промежуточных функциональных групп и порядка подачи в зону роста соответствующих "строительных блоков" вскоре можно будет "программировать" самоорганизацию молекулярных слоев.

Самосборка относится к типичным методам получения наноструктур (наноматериалов) «снизу-вверх». Основная задача, которая стоит при ее реализации — это необходимость таким образом повлиять на параметры системы и так задать свойства отдельных частиц, чтобы они организовывались с образованием желаемой структуры. Самосборка находится в основе многих процессов супрамолекулярной химии, где «инструкции», как собирать большие объекты, «закодированы» в структурных особенностях отдельных молекул. Следует отличать самосборку от самоорганизации, которая может быть использована как механизм создания сложных «шаблонов», процессов и структур на более высоком иерархическом уровне организации, чем тот, что наблюдался в исходной системе. Стремление к самоорганизации оказалась очень сильным молекулы, случайно оказавшиеся не на своем месте, сдвигались так, чтобы уступить место более подходящим. Этого уда-

лось добиться за счет так называемых встроенных инструкций— заданных свойств молекул, которые определяли их поведение в данных условиях.

Супрамолекулярная (надмолекулярная) химия (Supramolecular chemistry) — междисциплинарная область науки, включающая химические, физические и биологические аспекты рассмотрения более сложных, чем молекулы, химических систем, связанных в единое целое посредством межмолекулярных (нековалентных) взаимодействий. Объекты супрамолекулярной химии — супрамолекулярные ансамбли, строящиеся самопроизвольно из комплементарных, то есть имеющих геометрическое и химическое соответствие фрагментов, подобно самопроизвольной сборке сложнейших пространственных структур в живой клетке. Одной из фундаментальных проблем современной химии является направленное конструирование таких систем, создание из молекулярных «строительных блоков» высокоупорядоченных супрамолекулярных соединений с заданной структурой и свойствами. Супрамолекулярные образования характеризуются пространственным расположением своих компонентов, их архитектурой, «супраструктурой», а также типами межмолекулярных взаимодействий, удерживающих компоненты вместе. В целом межмолекулярные взаимодействия слабее, чем ковалентные связи, так что супрамолекулярные ассоциаты менее стабильны термодинамически, более лабильны кинетически и более гибки динамически, чем молекулы.

Супрамолекулярную химию можно разделить на две широкие, частично перекрывающиеся области, в которых рассматриваются соответственно: супермолекулы и супрамолекулярные ансамбли — полимолекулярные ассоциаты, возникающие в результате спонтанной ассоциации неопределённо большого числа компонентов в специфическую фазу. Супрамолекулярной самосборкой является процесс спонтанной ассоциации двух и более компонентов, приводящий к образованию супермолекул или полимолекулярных ансамблей,

Эволюционная химия изучает процессы самоорганизации вещества: от атомов и простейших молекул до живых организмов. Одним из первых открытий, которые относят к эволюционной химии, является эффект самосовершенствования катализаторов в реакциях. Теория саморазвития открытых каталитических систем. Самосборка (англ. self-assembly) — процесс образования упорядоченной надмолекулярной структуры или среды, в котором в практически неизменном виде принимают участие только компоненты (элементы) исходной

структуры, аддитивно составляющие или «собирающие», как части целого, результирующую сложную структуру.

Ученые считают, что искусственная самоорганизация моделирует многие процессы биологической эволюции, в частности, возникновение первых живых организмов из неживой материи. Кроме того, самоорганизация может оказаться дешевым и полезным методом для нанотехнологий: создание решетки, которая у немецких физиков получилась сама, при помощи стандартных способов потребовало бы гораздо больше времени и сил.

Произошел скачкообразный эволюционный переход, что является характерной особенностью самоорганизации. Примером такого состояния являются эксперименты, где водные молекулы напоминают ДНК в нанотрубках. Переход из симметричных молекул неживой природы к ассиметричным биомолекулам живой мог произойти на начальном этапе химической эволюции, как самоорганизация материи.

С помощью нанотехнологий можно определенным образом разместить и связать между собой атомы, как происходят в живых организмах. Сложные организмы, подобные растениям и животным, используют молекулярные механизмы для производства и починки на клеточном и субклеточном уровнях. Клетку можно рассматривать как завод наномашин, состоящий из молекулярных прототипов, таких как белок, нуклеиновая кислота, липид и полисахарид. Они используются для производства энергии, обработки информации, саморепликации, самовосстановления и движения. Например, рибосома является клеточной нано-машиной, которая считывает информацию с цепочки РНК, с тем, чтобы построить входящие в состав белка аминокислоты. Это напоминает конвейерное производство автомобилей роботами в автомобильной промышленности.

Стремление к самоорганизации оказалась очень сильным: молекулы, случайно оказавшиеся не на своем месте, сдвигались так, чтобы "уступить" место более подходящим. Этого удалось добиться за счет так называемых "встроенных инструкций" - заданных свойств молекул, которые определяли их поведение в данных условиях.

Ученые считают, что искусственная самоорганизация моделирует многие процессы биологической эволюции, в частности, возникновение первых живых организмов из неживой материи. Кроме того, самоорганизация может оказаться дешевым и полезным методом для нанотехнологий: создание решетки, которая у немецких физиков полу-

чилась сама, при помощи стандартных способов потребовало бы гораздо больше времени и сил.