

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ МАШИНЫ НА ОСНОВЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Томашевич Л. П., Хиневич А. С.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
Минск, Республика Беларусь

Позняк А. А. – канд. физ.-мат. наук, доцент

Описаны проектирование и конструирование многокомпонентных наноразмерных систем, которые могут выполнять определённые функции или совершать какой-либо вид работы подобно макроскопическим устройствам под воздействием внешнего импульса. Обсуждены основные принципы построения молекулярных машин на основе супрамолекулярных систем, а также приведена классификация по методам управления состоянием системы.

Развитие супрамолекулярной химии позволило распространить концепцию устройства, обеспечивающего выполнение сложной функции в результате определенного сочетания компонентов системы, на молекулярный уровень и, как следствие, стимулировало зарождение молекулярной электроники и фотоники. Основной тенденцией в наше время является стремление к уменьшению веса и размера функционирующего устройства. Миниатюризация электронных устройств и приборов на их основе обеспечивает как увеличение их быстродействия, так и уменьшение потребляемой при их работе мощности [1].

В рамках супрамолекулярной химии проводились исследования молекулярных электронных машин [2], в ходе которых возникла идея о том, что молекулы могут быть значительно более удобными строительными элементами, чем атомы, при создании наноразмерных машин и приборов [3]. Эта идея основывается на положениях:

- 1) молекулы являются стабильными образованиями;
- 2) в природе используются молекулы, а не атомы для строительства большого числа разнообразных наноприборов и наномашин, которые поддерживают жизнь;
- 3) большинство лабораторных химических процессов имеют дело с молекулами, а не атомами;
- 4) молекулы являются объектами, уже обладающими четкими формами и имеющими свойства, необходимые для работы таких машин;
- 5) молекулы могут собираться самостоятельно или же их можно соединять для образования более крупных структур.

С развитием химии супрамолекулярных структур стало ясно, что супрамолекулярный подход открывает практически безграничные возможности для проектирования и создания искусственных молекулярных устройств и машин [4]. Молекулярные устройства могут быть определены как совокупность определённого количества молекулярных компонентов, направленных на достижение конкретных функций. Каждый молекулярный компонент выполняет одно действие, в то время как вся супрамолекулярная конструкция выполняет более сложную функцию, которая реализуется в результате взаимодействия различных составляющих молекулярного устройства.

Молекулярные машины — это особый вид молекулярных устройств, в которых компоненты могут менять свое положение относительно друг друга в результате воздействия какого-либо внешнего фактора [5]. Будучи структурно организованными и функционально интегрированными химическими системами, молекулярные устройства [1] основаны на определенной пространственной организации специфических компонентов, и могут быть встроены в супрамолекулярные структуры. Функция, осуществляемая устройством, является следствием интегрирования элементарных операций, выполняемых отдельными компонентами. Можно

выделить два основных типа компонентов, входящих в такие устройства: активные компоненты, которые осуществляют заданную операцию (принимают, отдают или передают фотоны, электроны, ионы и т.д.), и структурные компоненты, которые участвуют в создании супрамолекулярной архитектуры, задавая необходимое пространственное расположение активных компонентов, в частности, за счет процессов распознавания.



Рисунок 1 – Схема работы молекулярных машин

Молекулярные машины — это устройства, в которых имеется антенна, воспринимающая внешнее воздействие, и преобразователь полученной энергии. Результатом преобразования энергии должно быть, либо конформационное изменение, либо движение всей супрасистемы или её фрагментов относительно друг друга [1]. При создании молекулярных и супрамолекулярных устройств и машин в качестве компонентов используются молекулы, способные к переносу электрона (виологены, металлопорфирины, тетратиофульвалены, политиофены). Фоточувствительными элементами служат хромофорные органические молекулы. Для фотоуправления используются молекулы стильбенов, спиронафтоксазинов и хроменов. Отличием молекулярных устройств от молекулярных машин является то, что в устройствах происходит преобразование одних видов энергии в другие, в то время как в молекулярной машине преобразование одного вида энергии в другой приводит к осуществлению определённой работы. Например, молекулярная машина может работать подобно механическим моторам, роторам, насосам. Как правило, молекулярные устройства являются частью молекулярных машин (рисунок 1).

Приборы и машины молекулярного уровня функционируют за счет электронной и/или ядерной перекомпоновки, и, подобно макроскопическим приборам и машинам, нуждаются в энергии для функционирования и в сигналах для связи с оператором. Энергия, необходимая для функционирования молекулярного прибора или машины, может поставляться в виде химического реактива, поглощенного фотона, или добавления или удаления электрона. Для того, чтобы осуществлять управление и контроль работы молекулярных приборов или машин, необходим подходящий сигнал. Поскольку хотя бы один молекулярный компонент системы изменяет свое состояние при выполнении требуемой функции, можно использовать любой сигнал, связанный с таким изменением.

Шкала продолжительности работы молекулярного прибора и машины может находиться в диапазоне от пикосекунды до нескольких дней в зависимости от природы осуществляемых процессов. Процессы переноса энергии, электронов и протонов, а также реакции изомеризации могут протекать очень быстро, но крупные и сложные перемещения составных частей могут происходить значительно медленнее. Информация о константах скорости реакций может быть получена с помощью обычных кинетических методов при реализации медленных процессов, с помощью электрохимии и хроматографии с прерыванием потока при относительно быстрых процессах, и с помощью спектроскопии вспышки (с разными временными шкалами) для очень быстрых процессов [2]. Молекулярные приборы и машины могут выполнять очень разнообразные функции. Они могут участвовать в передаче сигналов (в виде энергии, электронов, протонов и т.д.), обработке информации (например, с помощью логической схемы молекулярного уровня), преобразовании энергии (например, преобразовании света в электрохимический потенциал или химическое топливо), и в целом ряде процессов механического типа (например, перемещении вещества через мембрану).

В настоящее время ведутся разработки наборов компонентов молекулярного уровня для обработки информации. Эти химические соединения способны играть роль проводов, выключателей, элементов памяти, сенсоров, антенн, электрических разъемов, систем удлинительных кабелей, и логических схем для наноразмерных машин. В частности, исследование молекулярных соединений, способных выполнять бинарные логические операции, может привести к практическому применению, к такому как маркировка и разметка очень маленьких объектов и, в конечном итоге, к проектированию и созданию молекулярного компьютера.

Таким образом, активные научные исследования в области разработки молекулярных машин позволили к настоящему времени создать самые разнообразные по структуре и функциональности устройства. Важно, что не менее активно развивается и исследование, связанные с использованием конструкций молекулярных машин для практических применений.

Пример практического использования молекулярных машин продемонстрировали исследователи из Манчестера и Эдинбурга. Они создали примитивный искусственный аналог рибосомы — ротаксановую наномашину, способную синтезировать пептиды заданного состава. Кольцевая молекула перемещается по линейной молекуле-матрице, состоящей из цепочки ароматических колец, к которым прикреплены аминокислоты, последовательно отсоединяя аминокислотные остатки от стержня и прикрепляя их к растущему пептиду. Если настоящая рибосома присоединяет 15-20 аминокислотных остатков в секунду, то у созданной наномашинки на присоединение одного остатка уходит 12 часов.

Список использованных источников:

1. Фёдорова, О.А. Супрамолекулярная химия: учеб. пособие / О. А. Фёдорова. – Москва: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2010 – 204 с.
2. Metzger, R.M., The quest for unimolecular devices / R.M. Metzger, C.A. Panetta // New Journal of Chemistry. – 1991. – Vol. 15. – 209 - 221 с.
3. Lehn, J.M. Supramolecular Chemistry – Scope and Perspectives Molecules, Supramolecules, and Molecular Devices / J.M. Lehn // Angewandte Chemie International Edition. – 1988. – Vol. 27. – 89 - 112 с.
4. Balzani, V. The Bottom-Up Approach to Molecular – Level Devices and Machines / V. Balzani, A. Credi, M. Venturi // Chemistry European Journal. – 2002. – Vol. 8. – 5524 – 5532 с
5. Sauvage, J.P. Molecular Machines and Motors (Structural Bonding) / J. P. Sauvage // Springer. – 2001. – 306 с.