

## МОЛЕКУЛИ ВО НАНОКАФЕЗИ: МАЛ ПРОСТОР, ГОЛЕМИ МОЖНОСТИ

проф. д-р Љупчо Пејов

Институт за хемија, Природно-математички факултет, Скопје

Темелното разбирање на динамиката и реактивноста на молекулите и нековалентно сврзаните молекуларни кластери во нанокафези и други медиуми кои го лимитираат нивното движење е од клучно значење за современата наука и технологија. Во реалноста, најголем дел од процесите релевантни за различни подрачја, од биолошките системи до науката за материјали и наноелектрониката, се одвиваат во услови на ограничено движење на молекулите или нивните асоцијати. Типични примери за ограничувачки медиуми („нанокафези“) се фулерените, наноцевките (како и нивните супрамолекуларни аналози) и нанопорозните материјали воопшто. Еден од најспоменуваните вакви медиуми во последно време е биолошкиот трансмембрански канал аквапорин, кој има клучна улога во транспортот на вода и јони низ клетките. Овие сознанија довеле дури до тоа да во голем дел од современата научна литература се зборува на пример за т.н. „биолошка вода“ кога се истакнува дека станува збор за вода во биолошките системи.

Досегашниот напредок во експерименталните синтетски техники и развојот на таканаречената „молекуларна хирургија“ овозможиле добивање на голем број енкапсулирани молекули и молекуларни кластери во различни наноконтејнери (нанокафези) и други ограничувачки медиуми (како што се различните фулерени, но и наноцевки и најразлични нанопорозни материјали).

Најинтригантните и по многу нешта единствени својства на ваквите т.н. „ендоедарски“ молекули односно кластери се:

- 1) можноста за стабилизација на невообичаени и понекогаш дури и силно реактивни видови во наноконтејнерите;
- 2) промена на редоследот на стабилност на самите наноконтејнери како последица на енкапсулацијата;
- 3) влијанието на гостинската молекула/молекуларен кластер врз својствата на наноконтејнерот-домаќин и обратно.

Вредно е да се напомене дека енкапсулирањето може да влијае и на самиот карактер на интеракција помеѓу гостинските видови. Најдраматичен пример за претходното е енкапсулирањето на  $\text{He}_2$  во  $\text{C}_{60}$ , каде како последица на поларизацијата на гостинските видови под дејство на нанокафезот,  $\text{He} \dots \text{He}$  интеракцијата добива

делумен карактер на ковалентна врска. Од друга страна, меѓумолекуларните интеракции се од клучна важност во многу области од науката. Нековалентно сврзаните молекуларни кластери всушност ја премостуваат границата помеѓу индивидуалните (изолирани) молекуларни видови во парна фаза и кондензираните фази кои тие молекули ги образуваат. Точниот теориски опис на нековалентните интеракции во голем број случаи овозможува егзактна интерпретација на експерименталните податоци добиени со најсовремени техники како и суштинско разбирање на процесите во кои индивидуалните молекули учествуваат. Освен за ваквите фундаментални аспекти, значењето на интермолекуларните интеракции е огромно и за разбирање на голем број процеси релевантни за технологијата, биомедицинските науки и човековата околина (на пример кај катализата, површинската и колоидна хемија, науката за материјали, инженерството на кристали, атмосферската хемија и астрохемијата итн.).

Неодамнешните истражувања покажале дека ограничувачките нано-медиуми може суштински да влијаат на типот и интензитетот на меѓумолекуларните интеракции. Во одредени ситуации е најдено дека ограничувачкиот медиум може да послужи како многу ефективен катализатор за поедини реакции (на пример пренос на протони), но и да иницира други својства поврзани со реактивноста на индивидуалните молекуларни видови, кои не се набљудуваат при обични услови. Ова поле за истражување е сеуште отворено во најголемиот број аспекти, особено во однос на експлицитно вклучување на динамиката на индивидуалните молекули односно кластери во ограничувачкиот медиум и нејзиното влијание врз набљудуваните својства (спектроскопски, реактивни, итн.).