



ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР, СПОСОБНЫХ К САМОСБОРКЕ

Федоров Михаил Юрьевич

Научный сотрудник, Кафедра физики наноструктур, Новосибирский
государственный университет НГУ
г. Новосибирск, Россия

Ефимова Светлана Андреевна

Научный сотрудник, Лаборатория биомолекулярных нанотехнологий,
Новосибирский государственный университет НГУ
г. Новосибирск, Россия

Аннотация

Самосборка наноструктур представляет собой процесс, в котором разупорядоченные компоненты самостоятельно организуются в упорядоченные макроскопические или мезоскопические структуры под действием локальных взаимодействий. Этот принцип, широко используемый в биологических системах, является фундаментальным инструментом в нанотехнологии для создания сложных функциональных материалов снизу вверх. Данная работа посвящена исследованию термодинамических и кинетических основ самосборки, а также анализу различных типов самособирающихся наноструктур, включая ДНК-оригами, пептидные нановолокна и коллоидные кристаллы. Рассматривается роль нековалентных взаимодействий, таких как водородные связи и гидрофобные силы, в управлении процессом. Подчеркивается потенциал применения этих систем в биомедицине для доставки лекарств, тканевой инженерии и в создании новых оптоэлектронных устройств.

Ключевые слова: самосборка, наноструктуры, ДНК-оригами, пептиды, коллоидные частицы, нанотехнология снизу вверх, термодинамический контроль, функциональные материалы.

Введение

Самосборка — это спонтанный процесс, посредством которого элементарные единицы, находящиеся в равновесном или неравновесном состоянии, формируют упорядоченные структуры без внешнего вмешательства. В контексте нанотехнологии самосборка позволяет преодолеть ограничения традиционных методов создания структур, основанных на литографии и других подходах сверху вниз, которые становятся чрезмерно сложными и дорогими при работе с наноразмерами. Использование принципов самосборки, заимствованных из природы, является ключевым элементом стратегии нанотехнологии снизу вверх.

Самосборка управляется локальными, преимущественно нековалентными взаимодействиями между компонентами. Энергетически, движущей силой процесса является минимизация свободной энергии системы, которая достигается за счет формирования максимального количества благоприятных связей и максимизации энтропии растворителя. Успешный дизайн самособирающихся систем требует точного контроля над формой, химической функциональностью и условиями окружающей среды, такими как температура, концентрация и ионная сила. Понимание и воспроизведение этих естественных процессов является основой для создания сложных, многокомпонентных функциональных наносистем.

Термодинамические и Кинетические Аспекты Самосборки

Процесс самосборки находится под контролем термодинамических и кинетических факторов, понимание которых необходимо для проектирования стабильных и воспроизводимых наноструктур.

Термодинамический контроль. Самосборка по своей сути является процессом, идущим в сторону минимизации свободной энергии Гиббса системы. Вклад в это снижение вносят отрицательная энтальпия, связанная с формированием благоприятных межмолекулярных связей, таких как водородные связи, и положительная энтропия, часто возникающая за счет гидрофобного эффекта, который высвобождает молекулы воды из упорядоченной клатратной структуры вокруг неполярных поверхностей. Если конечная структура является наиболее стабильным термодинамически равновесным состоянием, говорят о термодинамически контролируемой самосборке.

Кинетический контроль. Во многих случаях желаемая структура может быть не самой стабильной, а формироваться быстрее других возможных состояний. В этом случае процесс находится под кинетическим контролем. Кинетически контролируемые наноструктуры формируются, когда активационный барьер для перехода в термодинамически более стабильное состояние слишком высок. Примером может служить быстрое формирование метастабильных полимерных мицелл, которые затем медленно переходят в более стабильные везикулы. Для успешного проектирования наноструктур необходимо уметь управлять как путем реакции, так и скоростью нуклеации и роста.

Роль внешней среды. Внешние условия, такие как температура, кислотность среды и концентрация ионов, могут использоваться как переключатели, управляющие процессом самосборки. Изменение этих параметров может изменить баланс между различными нековалентными взаимодействиями, индуцируя диссоциацию или, наоборот, сборку наноструктур. Это позволяет создавать динамические и адаптивные материалы.

Молекулярные и Биомолекулярные Самосборки

Биологические молекулы, такие как нуклеиновые кислоты и белки, являются идеальными строительными блоками для самосборки благодаря их высокой специфичности и программируемости.

ДНК-оригами. ДНК-оригами — это метод, использующий комплементарность азотистых оснований для создания сложных двумерных и трехмерных наноструктур. Длинная одноцепочечная молекула ДНК складывается в заданную форму с помощью большого количества коротких вспомогательных цепей, или скрепок. Этот метод позволяет достичь субнанометровой точности в проектировании, создавая нанороботы, контейнеры для лекарств и матрицы для точного позиционирования других наночастиц. Высокая специфичность связывания гарантирует предсказуемость конечной структуры.

Пептидная самосборка. Пептиды, короткие цепи аминокислот, способны к самосборке в высокоупорядоченные структуры, такие как нановолокна, нанотрубки или везикулы. Самостоятельная организация обусловлена водородными связями между пептидными цепями, гидрофобным эффектом и электростатическими взаимодействиями. Эти пептидные нановолокна обладают высокой биосовместимостью и используются в тканевой инженерии в качестве каркасов для роста клеток и в регенеративной медицине. Их преимущество заключается в простоте синтеза и возможности биodeградации.

Самосборка белков. Использование белков, например, вирусных капсидов или ферритина, позволяет создавать полые, высокосимметричные наноконтейнеры. Эти природные структуры могут быть модифицированы для инкапсуляции лекарств или генетического материала, обеспечивая целенаправленную доставку к больным клеткам. Самосборка белков является одним из самых эффективных примеров достижения сложной архитектуры в природе.

Самосборка Коллоидных и Неорганических Систем

Самосборка не ограничивается биомолекулами, активно используются также коллоидные частицы, полимеры и неорганические нанокристаллы.

Коллоидные кристаллы. При определенных условиях диспергированные в растворе монодисперсные коллоидные частицы могут самоорганизовываться в упорядоченные трехмерные решетки, аналогичные атомным кристаллам. Эти структуры называются коллоидными кристаллами. Они обладают уникальными оптическими свойствами, в частности, способностью к запрету или пропуску света в определенных диапазонах частот, что делает их перспективными для создания фотонных кристаллов и оптоэлектронных устройств. Управление самосборкой коллоидов достигается путем изменения концентрации, ионной силы или добавления полимеров.

Блок-сополимеры. Блок-сополимеры, состоящие из двух или более химически различных полимерных цепей, соединенных вместе, могут самоорганизовываться в растворе или в тонких пленках. Несовместимость блоков приводит к микрофазному разделению и образованию упорядоченных наноструктур, таких как сферы, цилиндры, ламели. Эти структуры используются в качестве шаблонов для литографии в нанометровом масштабе и в создании высокоселективных мембран.

Самосборка на поверхности. Самосборка может протекать на границе раздела фаз, например, на твердой поверхности. Самособирающиеся монослои, формирующиеся при адсорбции молекул с амфифильными свойствами на подложке, используются для модификации поверхности, контроля смачиваемости и создания функциональных покрытий. Этот метод позволяет получать высокоупорядоченные структуры с контролируемой ориентацией молекул.

Применение Самосборки в Нанотехнологии

Способность создавать сложные, функциональные структуры в одну стадию делает самосборку ключевой для будущих технологий.

Биомедицинские приложения. В биомедицине самосборка используется для создания наноконтейнеров для доставки лекарств, способных целенаправленно транспортировать терапевтические агенты к опухолям или очагам воспаления. Пептидные и полимерные нановолокна служат скаффолдами для тканевой инженерии, имитируя естественную внеклеточную матрицу и способствуя росту и дифференцировке клеток.

Оптоэлектроника и сенсоры. Самосборка коллоидных кристаллов и наночастиц позволяет создавать фотонные кристаллы с управляемой оптической зоной. Самособирающиеся структуры также используются для создания высокочувствительных наносенсоров, способных детектировать минимальные концентрации химических или биологических веществ за счет изменения их оптических или электрических свойств при захвате целевой молекулы.

Новые материалы. Самосборка является перспективным методом для создания метаматериалов и нанокомпозитов с новыми свойствами. Например, самоорганизация наночастиц в упорядоченные массивы может приводить к уникальным плазмонным эффектам, а включение самособирающихся наноструктур в полимерные матрицы может повышать их прочность и термостабильность.

Заключение

Исследование и управление процессами самосборки наноструктур является центральной задачей современной нанотехнологии, открывающей путь к созданию сложных функциональных систем с беспрецедентным уровнем контроля.

Переход от пассивной к активной и динамической самосборке, управляемой внешними стимулами, является ключевым направлением будущих исследований. Дальнейшее развитие методов программирования молекулярного дизайна, особенно в области ДНК-оригами и пептидных структур, позволит создавать адаптивные, интеллектуальные наномшины и материалы, которые найдут применение от адресной доставки лекарств до революционных оптических устройств.

Литература

1. Федоров М. Ю. Принципы самосборки наноструктур в природе и технологии. – М.: Физматлит, 2024. – 410 с.
2. Ефимова С. А. ДНК-оригами и его применение в конструировании наноустройств. // Нанотехнологии и материалы. – 2025. – Т. 16, № 1. – С. 20–35.
3. Чисхольм М. К. Самоорганизующиеся материалы и нанотехнологии. – СПб: Политехника, 2020. – 350 с.
4. Whitesides G. M., Boncheva M. The chemistry of self-assembly. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2002. – Vol. 99, Suppl. 4. – P. 4769–4774.
5. Zhang S. Fabrication of novel biomaterials through molecular self-assembly. // Nat. Biotechnol. – 2003. – Vol. 21, № 10. – P. 1171–1178.