



Харківський національний університет
ім. В. Н. Каразіна
Кафедра прикладної хімії

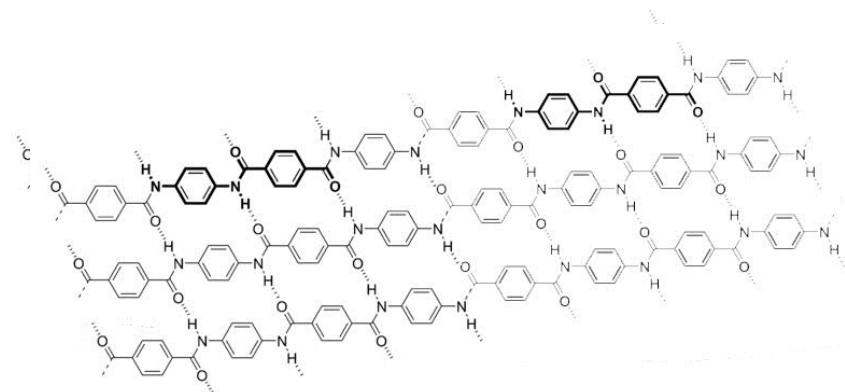
Курс:

**Фундаментальні основи органічних функціональних
матеріалів**

Розділ 1:

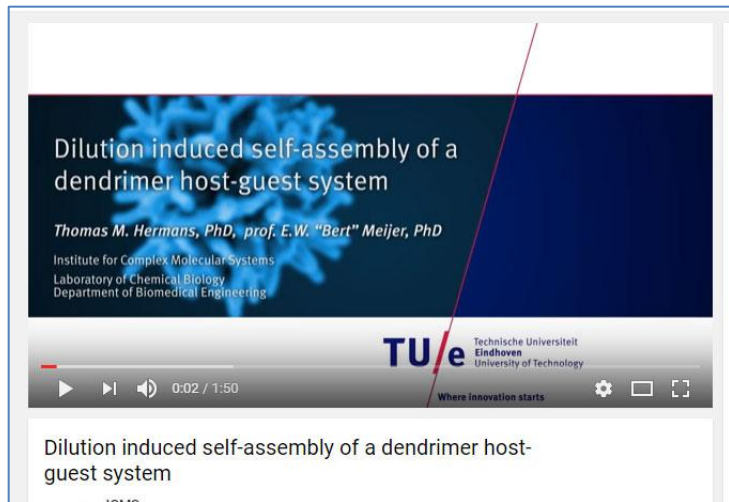
Електронна будова органічних сполук

Комихов Сергій Олександрович



Лекція 1:

Тема: Молекулярна будова і молекулярна самоорганізація



<https://www.youtube.com/watch?v=zDj2rjeaHXE>

[Offline video here](#)

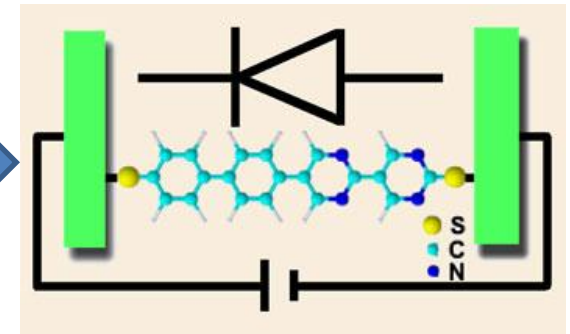
[T. M. Hermans, Nature Nanotechnology 4, 721 - 726 \(2009\)](#)

Що таке "органічні матеріали":

Барвники і люмінофори

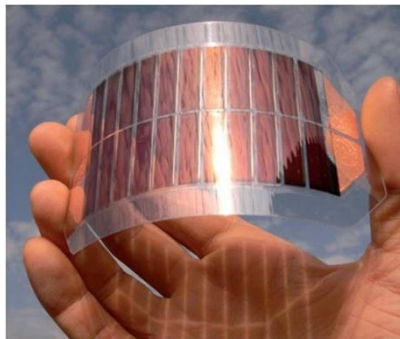


Молекулярна електроніка



Органічні матеріали:

Фотовольтаїка



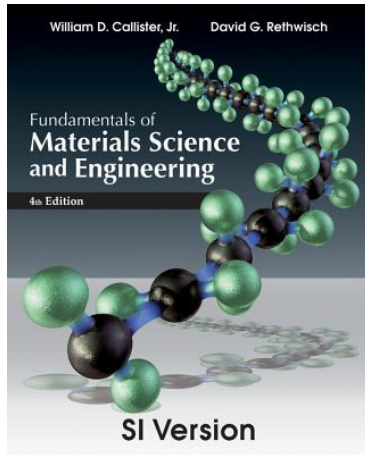
Органічні напівпровідники



Рідкі кристали



Література:



William D. Callister. Fundamentals of Material Science and Engineering.

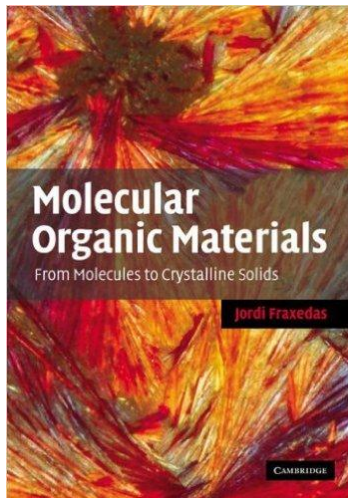
Будова атома. Міжатомні зв'язки.

Метали, кераміка, полімери.

Фазові переходи.

Механічні, електричні, оптичні, термічні, магнітні властивості.

Дизайн матеріалів.



Jordi Fraxedas. Molecular Organic Molecules.

Молекули як білдинг-блоки для побудови матеріалів. Хімічні зв'язки.

Міжмолекулярна взаємодія.

Органічні напівпровідники, органічні метали, органічні магніти...

“Molecular Engineering”

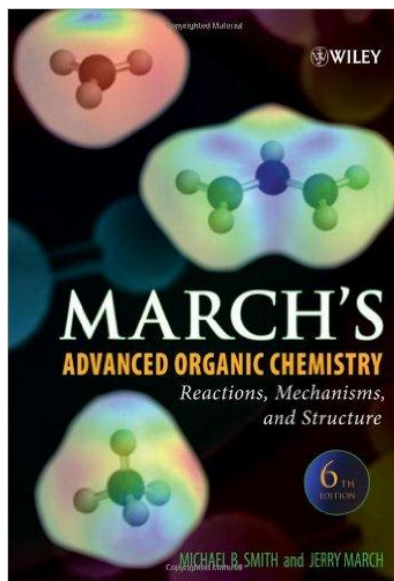
“Crystal Engineering”

Молекулярні інтерфейси.

Література:

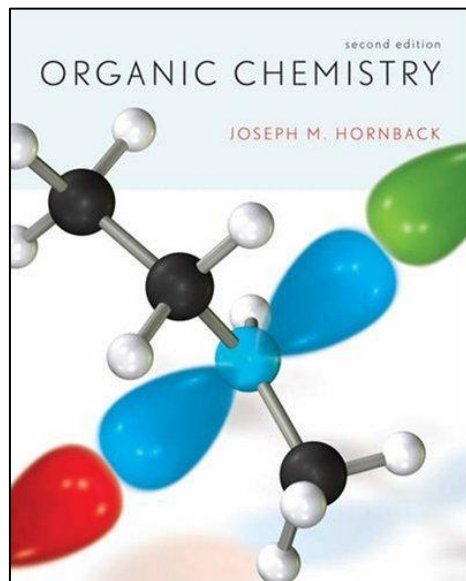
Michael B. Smith

**March's Advanced Organic
Chemistry: Reactions,
Mechanisms, and Structure**

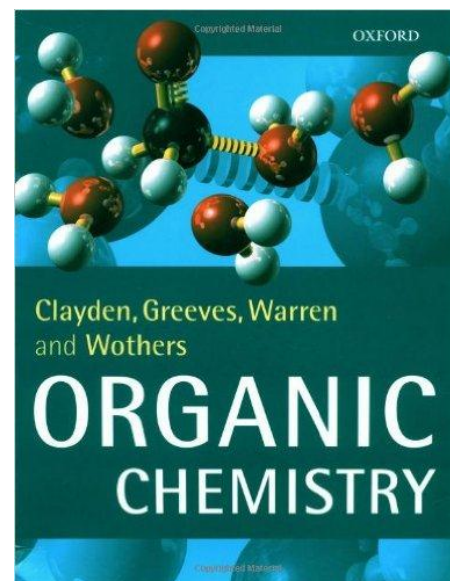


Joseph M. Hornback

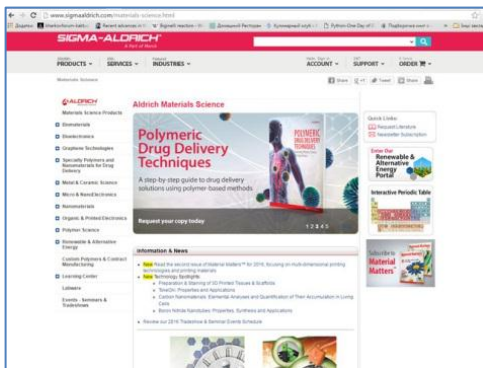
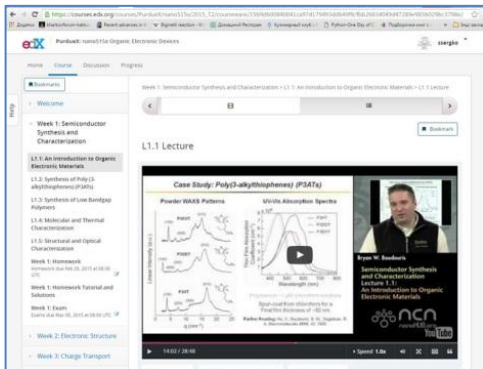
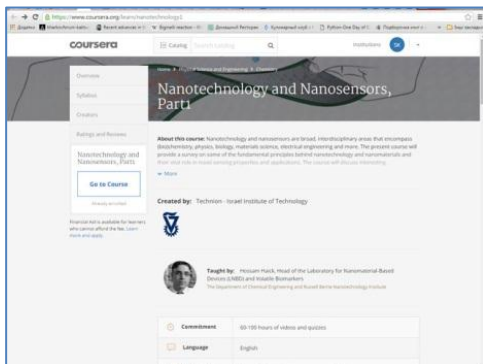
Organic Chemistry



**Jonathan Clayden, Nick
Greeves, Stuart Warren**
Organic Chemistry

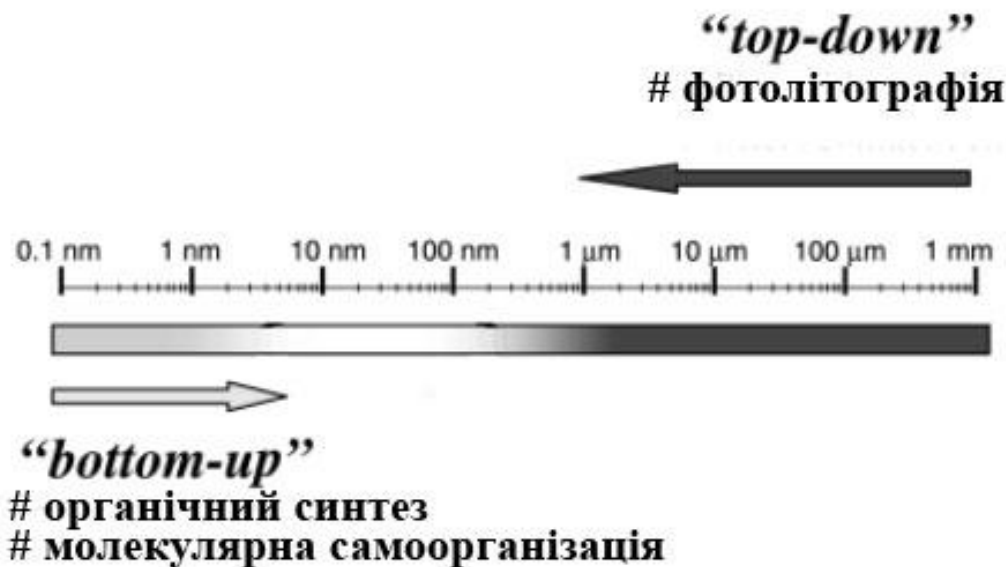


Додатково – інтернет-курси:



1. <https://www.coursera.org/>; <https://www.edx.org/>.
2. Nanotechnology and Nanosensors: Part 1, 2. Hossam Haick, Technion - Israel Institute of Technology, <https://www.coursera.org/learn/nanotechnology1/home/welcome> <https://www.coursera.org/learn/nanotechnology2/home/welcome>
3. Organic Electronic Devices. Bryan Boudouris, **Purdue university** <https://courses.edx.org/courses/course-v1:MITx+3.15x+1T2015/info>
4. Organic Solar Cells - Theory and Practice. Eva Bundgaard, Technical University of Denmark <https://www.coursera.org/learn/solar-cell/home/welcome>
5. Electrical, Optical, Magnetic Materials and Devices, **Massachusetts Institute of Technology** <https://courses.edx.org/courses/course-v1:MITx+3.15x+1T2015/course/>
6. <http://www.sigmaaldrich.com/materials-science.html>

Розробка нових матеріалів – два підходи: “top-down” та “bottom-up”



“bottom-up” підхід:

- Направлений синтез органічних сполук;
- Реакції полімеризації;
- Молекулярна самоорганізація
- Dip-pen (DPN)-нанолітографія

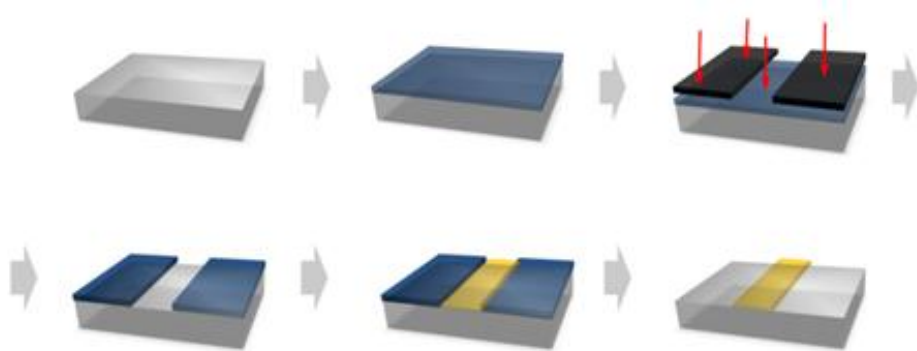
“top-down” підхід:

- фотолітографія

Розробка нових матеріалів – два підходи: “top-down” та “bottom-up”

“top-down” підхід: Фотолітографія:

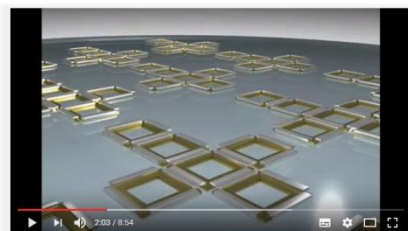
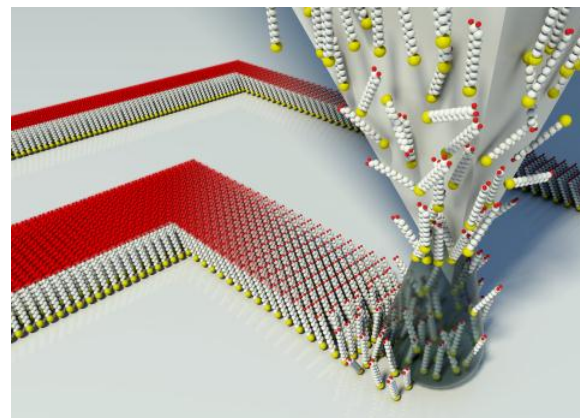
- нанесення фоторезисту
- накладання маски
- експонування опроміненням
- проява фоторезисту
- обробка поверхні, видалення фоторезисту і отримання деталі



“bottom-up” підхід: Dip-pen (DPN)- нанолітографія:

Angew. Chem. Int. Ed. 43 (1): 30–45

- використання атомно-силової мікроскопії (AFC) для нанесення матеріалу
- використання молекулярних чорнил



Self-Assembly of Lithographically Patterned 3D
Micro/Nanostructures

Мікроконтейнери, зроблені за
допомогою фотолітографії:

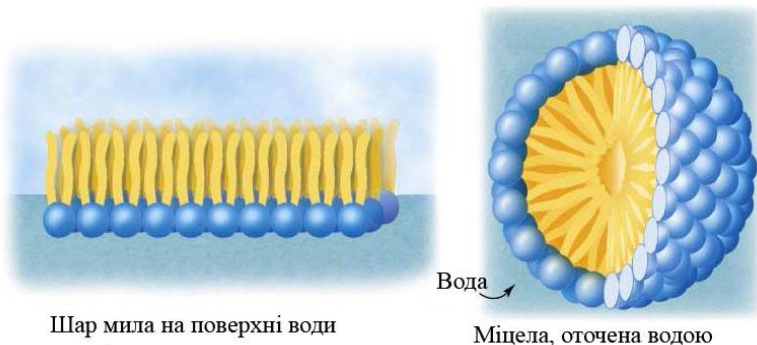
<https://www.youtube.com/watch?v=GL0jm9b6GgU>

[offline](#)

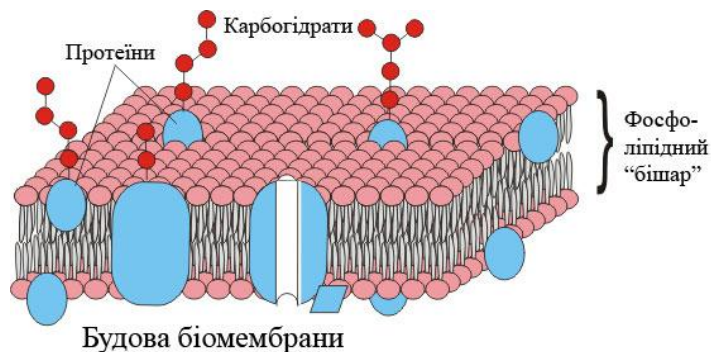
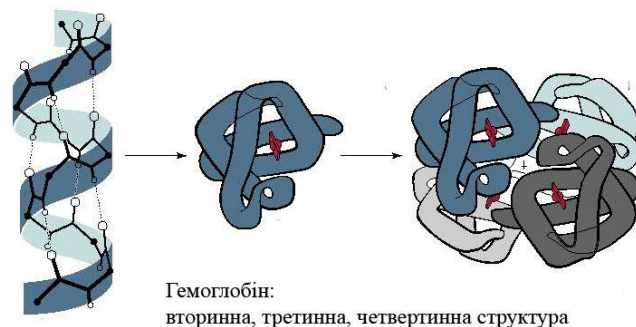
[Offline video here](#)

Молекулярна самоорганізація в природі:

Міжмолекулярна:



Внутрішньомолекулярна:



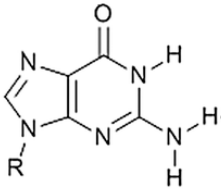
- Відкриває **необмежені** можливості побудови штучних матеріалів із заданими властивостями.

Мета:

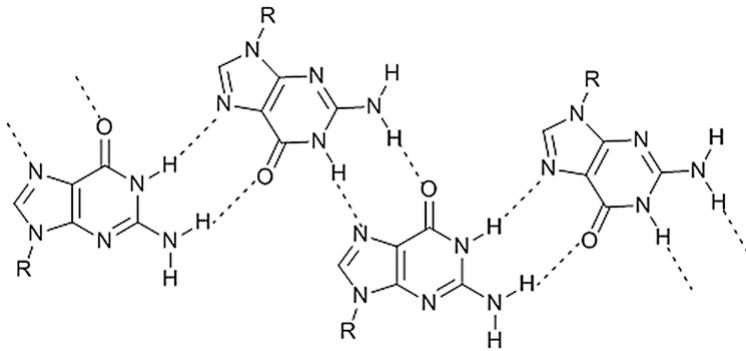
- Вивчити / повторити основні особливості молекулярної і надмолекулярної структури органічних сполук
- познайомитись з основними принципами молекулярної самоорганізації

Властивості матеріалу визначають:

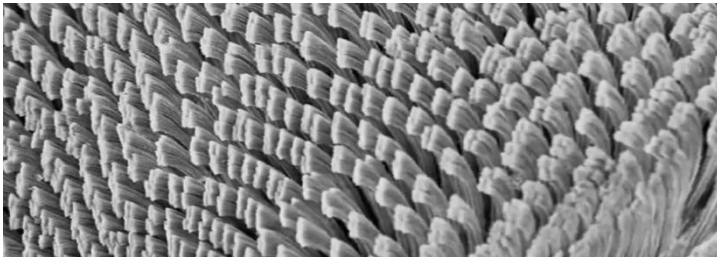
1) Молекулярна структура



2) Надмолекулярна структура



3) Мікроструктура / наноструктура



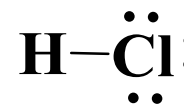
1. Ковалентні зв'язки
2. Іонні зв'язки / взаємодія між іонами
3. Водневі зв'язки
4. Гідрофобна взаємодія
5. π -стекинг
6. Ван-дер-ваальсові сили.

Хімічний зв'язок

Льюїсова структура:

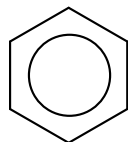
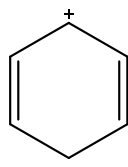
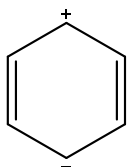
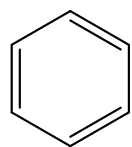
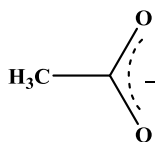
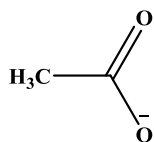
IUPAC (<http://goldbook.iupac.org/terms/view/L03513>)

1. Валентні електрони показують у вигляді крапок, розташованих між атомами, які пов'язані зв'язком; непов'язані електрони у вигляді крапок, розташованих поруч з атомами, з якими вони асоційовані.
2. Формальні заряди ("+" та "-") на атомах вказують різницю між зарядом ядра та загальною кількістю електронів, вважаючи, що валентні електрони поділені **порівну** між атомами, яким вони належать (=незалежно від їх електронегативності).
3. Валентні електронні пари зазвичай показують у вигляді ліній, які представляють ковалентний зв'язок.



Питання:

1) Які структури є льюїсовими, які – не є такими?



Питання:

2) Навіщо це все?

Іонний зв'язок

- електронна пара повністю належить одному з атомів;
- для максимальної стабільності октетне правило має бути виконане на кожному іоні.

Енергія – 100 – 350 кДж/моль

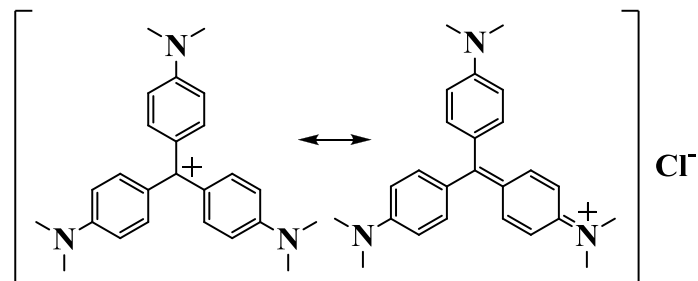
Сполуки характеризуються:

- Високими температурами плавлення;
- Розчинністю в полярних розчинниках; у розчинній формі – диссоційовані;
- Електропровідність
- Механічна хрупкість, непластичність.

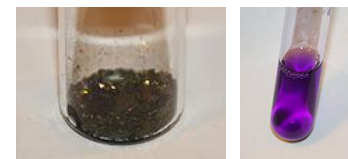
Важливо!

- 1) Чисто іонного зв'язку не існує!
- 2) Будь-який іонний зв'язок має частково ковалентний характер.

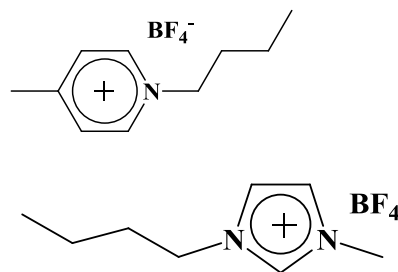
Приклади сполук з іонним зв'язком:



Кристалічний фіолетовий;
Т. пл. 205°(розкл).



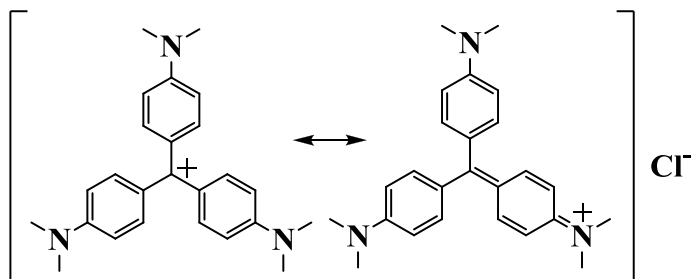
Органічні іонні рідини:



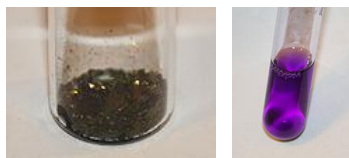
- Розчинники з незвичайними властивостями (основність / кислотність, гідрофобність / гідрофільність, в'язкість, широкий температурний інтервал застосування і т. д.

Іонний і ковалентний зв'язок

Іонна сполука:



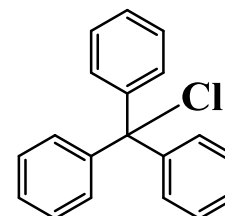
Кристалічний
фіолетовий;
Т. пл. 205°(розкл).



Сполуки характеризуються:

- Високими температурами плавлення;
- Розчинністю в полярних розчинниках; у розчинній формі – дисоційовані;
- Електропровідність
- Механічна хрупкість, непластичність.

Ковалентна сполука:



Безбарвний

Т. пл. 109°C, Кип. 230°C

Розчинний у CHCl_3 , бензені, ацетоні, етері,
ТГФ, гексані

Сполуки характеризуються:

- Відносно низькими температурами плавлення (порівняно зі сполуками з іонним зв'язком);
- Більш характерною є розчинність у неполярних розчинниках
- Низькою електропровідністю, високим електричним опором.

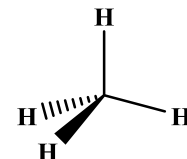
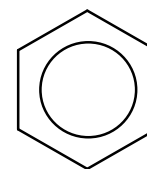
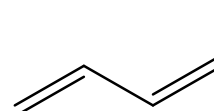
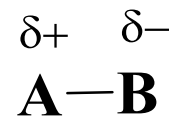
Ковалентний зв'язок:

- електронна пара належить у *тій чи іншій мірі* обом атомам;
- виконання правила октету досягається за рахунок спільності електронної пари.

Розрізняють:

- неполярний зв'язок (обидва атоми мають **однакову електронегативність** == належать одному елементу)
- полярний зв'язок (атоми мають **різну**, але достатньо близьку **електронегативність**).

Електронна пара **не обов'язково** належить лише двом атомам - делокалізовані зв'язки



Питання:

електронегативність??

Електронегативність:

Електронегативність χ : здатність атома притягувати спільну електронну пару (або електронну густину)

Згідно шкали Полінга – відносна величина; безрозмірна, розрахована на основі різниці в енергіях диссоціації

$$|\chi_A - \chi_B| = (\text{eV})^{-1/2} \sqrt{E_d(\text{AB}) - \frac{E_d(\text{AA}) + E_d(\text{BB})}{2}}$$

>> можливість розрахунку енергії диссоціації на основі електронегативності

$$E_d(\text{AB}) = \sqrt{E_d(\text{AA})E_d(\text{BB})} + 1.3(\chi_A - \chi_B)^2 \text{eV}$$

H 2.20																	He
Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60
Cs 0.79	Ba 0.89	La 1.1	* Hf 1.3	* Ta 1.5	* W 2.36	* Re 1.9	* Os 2.2	* Ir 2.20	* Pt 2.28	* Au 2.54	* Hg 2.00	* Tl 1.62	* Pb 1.87	* Bi 2.02	* Po 2.0	* At 2.2	* Rn 2.2
Fr >0.79 ^[en 1]	Ra 0.9	Ac 1.1	** Rf	** Db	** Sg	** Bh	** Hs	** Mt	** Ds	** Rg	** Cn	** Nh	** Fl	** Mc	** Lv	** Ts	** Og
			* Ce 1.12	* Pr 1.13	* Nd 1.14	* Pm 1.13	* Sm 1.17	* Eu 1.2	* Gd 1.2	* Tb 1.1	* Dy 1.22	* Ho 1.23	* Er 1.24	* Tm 1.25	* Yb 1.1	* Lu 1.27	
			** Th 1.3	** Pa 1.5	** U 1.38	** Np 1.36	** Pu 1.28	** Am 1.13	** Cm 1.28	** Bk 1.3	** Cf 1.3	** Es 1.3	** Fm 1.3	** Md 1.3	** No 1.3	** Lr 1.3 ^[en 2]	

Електронегативність:

Є декілька шкал електронегативності:

Mulliken – 1) абсолютна електронегативність; 2) на основі EI (енергії іонізації) та EA (Electron Affinity – спорідненість до електрону); 3) лінійна кореляція з електронегативностями за Полінгом

$$\chi = \frac{E_i + E_{ea}}{2}$$

Allred–Rochow: 1) абсолютна величина; 2) на основі ефективного заряду ядра і ковалентного радіусу атома; 3) лінійна кореляція з електронегативностями за Полінгом

$$\chi = 3590 \frac{Z_{\text{eff}}}{r_{\text{cov}}^2} + 0.744$$

Сполуки зі змішаним типом хімічного зв'язку:

%Іонний характер зв'язку =

$$\left(1 - e^{-\left(\frac{\Delta X}{2}\right)^2}\right) \cdot 100$$

CH₃MgI

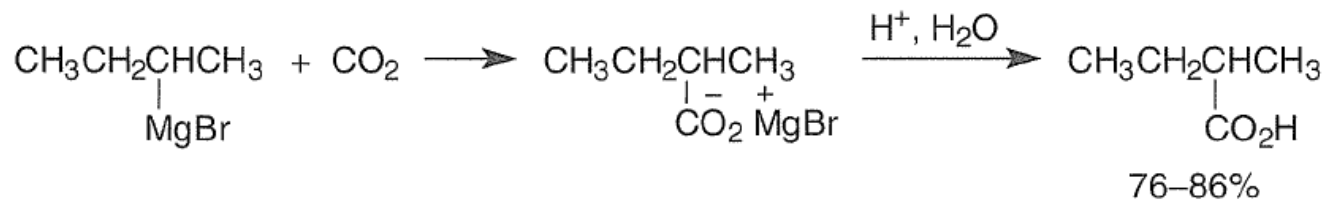
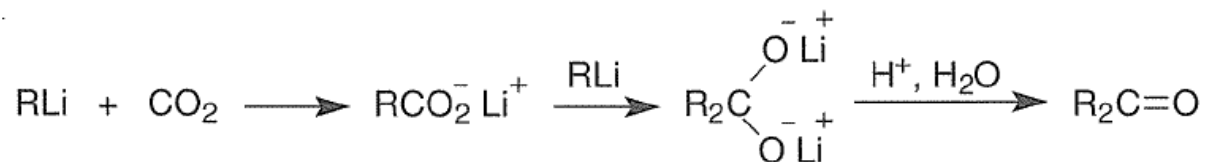
n-BuLi

ΔX – різниця електронегативностей

$\Delta X = 1.7 \gg 50\%$ іонності зв'язку

Electronegativity Values and Ionic Character

Element	Li	Mg	Ti	Al	Zn	Cu	Si	Sn	B	C
EN	0.97	1.23	1.32	1.47	1.66	1.75	1.74	1.72	2.01	2.50
% Ionicity	43	35	30	22	15	12	12	11	6	



Властивості ковалентного зв'язку:

Типи ковалентного зв'язку:

- одинарний (σ -зв'язок)
- подвійний (один σ -зв'язок і один π -зв'язок)
- потрійний (один σ -зв'язок і два π -зв'язки)

Чим принципово відрізняються?

1. Енергія (кДж/моль, ккал/моль)

2. Довжина (Å) – рівноважний відстань між центрами пов'язаних атомів

3. Полярність, тобто **дипольний момент**:

$$\mu = q l;$$

q -заряд, l – відстань між зарядами

4. Поляризованість - α

Наведений дипольний момент: $\mu' = \alpha E$;

E – зовнішнє електричне поле

Властивості ковалентного зв'язку: енергія зв'язку

Енергія зв'язку = ентальпія зв'язку –
IUPAC: середнє значення енергії диссоціації
зв'язку в газовій фазі.

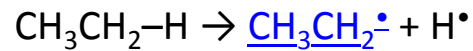
Визначається як адитивний вклад зв'язку до
ентальпії утворення речовини

$$\Delta H_{\text{обр}} = \sum \Delta H_{\text{св}}$$

Енергія та довжина ковалентного зв'язку:

C-O	340 кДж/моль	1.43 Å
C-C	360 кДж/моль	1.53 Å
C-H	430 кДж/моль	1.11 Å
C=C	600 кДж/моль	1.33 Å
C=O	690 кДж/моль	1.21 Å

Енергія диссоціації зв'язку - дещо інша річ!
= зміна ентальпії зв'язку в результаті
гомолітичної диссоціації



$$\Delta H = 423 \text{ кДж / моль}$$

Принцип адитивності:

- 1) Величина *певної власивості* молекули може бути розглянута як адитивна сума вкладів окремих структурних елементів (атомів, груп атомів, зв'язків і т. д.);
- 2) Вклади цих структурних елементів є однаковими у будь-яких молекулах.

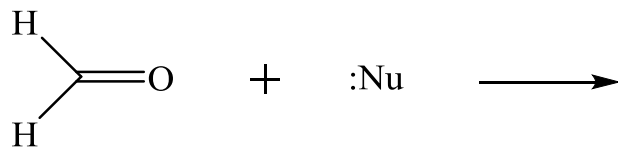
Ковалентний зв'язок: дипольний момент

Дипольний момент:

$$\mu = q l;$$

q -заряд, l – відстань між зарядами

$$\vec{\mu} = \sum_i q_i \vec{r}_i$$



Оцінка дипольного моменту:

Яка сполука є більш полярною –

CH₃Cl або CH₂Cl₂ ?

Орто- або мета-дихлоробензен?

Д/з.

- 1) Дипольний момент хлоробензену 1.56 D. Розрахувати, використовуючи адитивну схему, дипольні моменти о- і м-дихлоробензенів.
- 2) Застосування адитивної схеми для розрахунку дипольного моменту 4-нітро-N,N-диметиланіліну дає незадовільний результат. Чому?

Ковалентний зв'язок: поляризованість

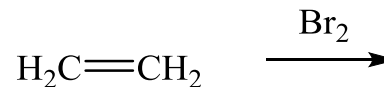
Поляризованість - α

Наведений дипольний момент: $\mu' = \alpha E$;

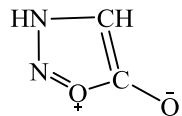
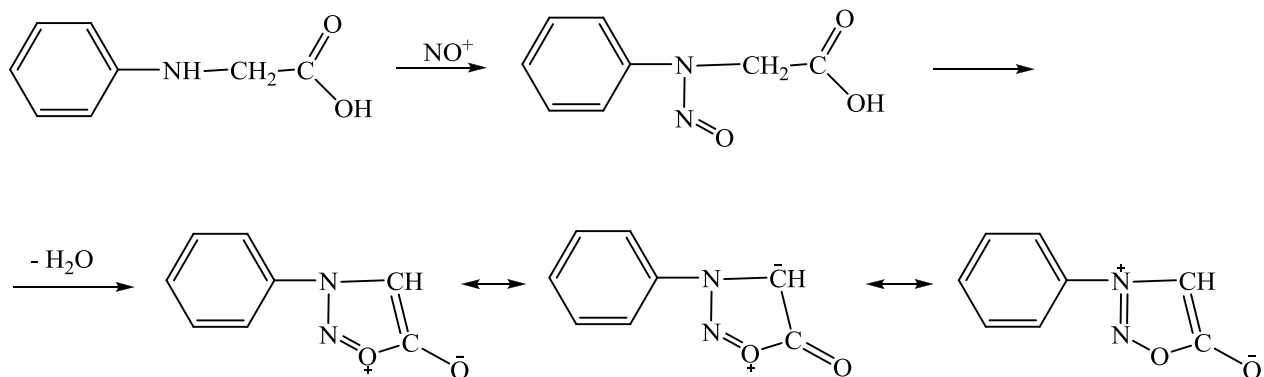
E – зовнішнє електричне поле

Оцінка поляризованості:

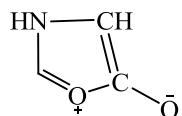
- 1) F, O, N; F, Cl, Br, I – як змінюється поляризованість?
- 2) одинарний, подвійний, потрійний зв'язок – як змінюється поляризованість?
- 3) Карбокатион, карбаніон, неіонний карбон?



Мезоіонні сполуки:



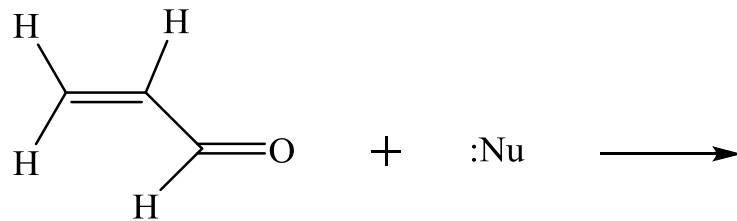
Сиднон
1935



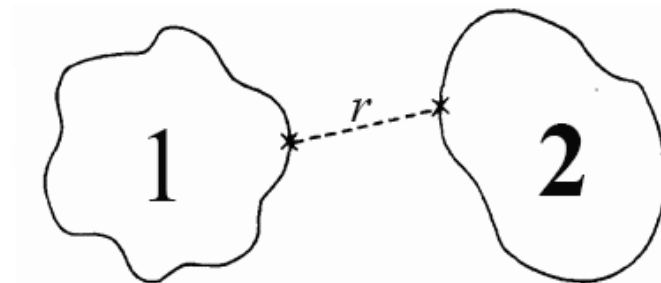
Мюнхнон
1935

- Стабільні кристалічні речовини з Т. пл., як правило, вище 100 °С.
- Характерні реакції електрофільного заміщення.

Ковалентний зв'язок: зарядовий та орбітальний внески



$$E = -\frac{q_1 q_2}{r} + 2 \sum_{i,j} \frac{c_i^2 c_j^2}{E_i - E_j} \beta_{ij}$$



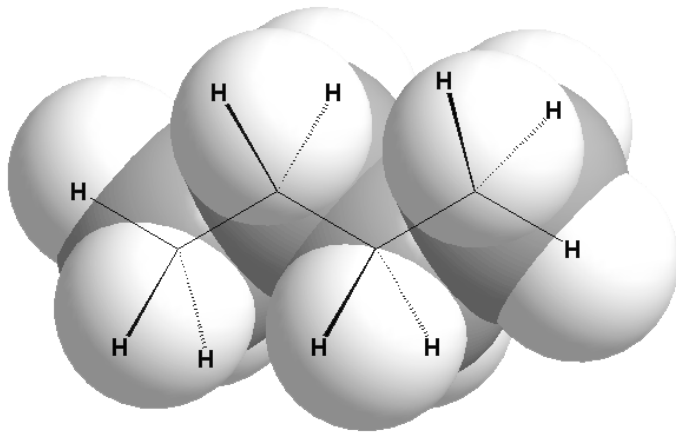
Теорія збуджень:

метод пошуку приблизного рішення
шляхом поступових наближень.

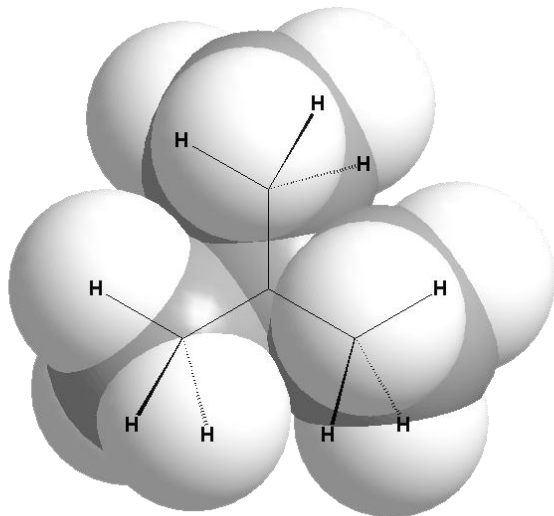
$$A = A_0 + \varepsilon^1 A_1 + \varepsilon^2 A_2 + \dots$$

$$A \approx A_0 + \varepsilon A_1$$

Міжмолекулярна взаємодія



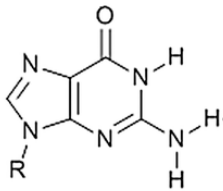
Т. кип. -0.5°C



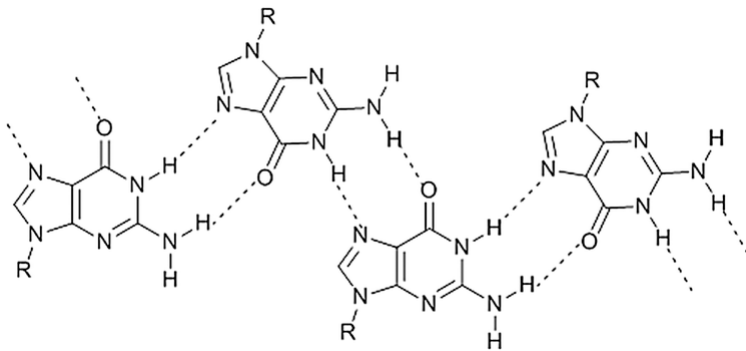
Т. кип. -11.7°C

Властивості матеріалу визначають:

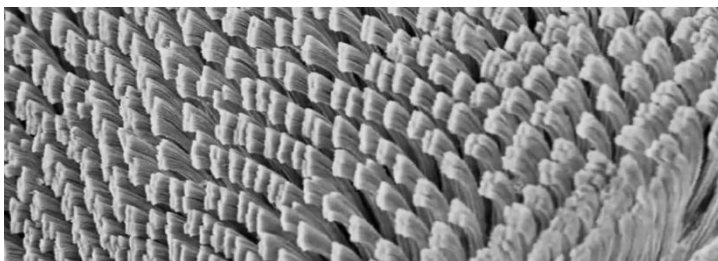
1) Молекулярна структура



2) Надмолекулярна структура



3) Мікроструктура / наноструктура



1. Ковалентні зв'язки
2. Іонні зв'язки / взаємодія між іонами
3. Водневі зв'язки
4. Гідрофобна взаємодія
5. π -стекинг
6. Ван-дер-ваальсові сили.

Ван-дер-ваальсова взаємодія

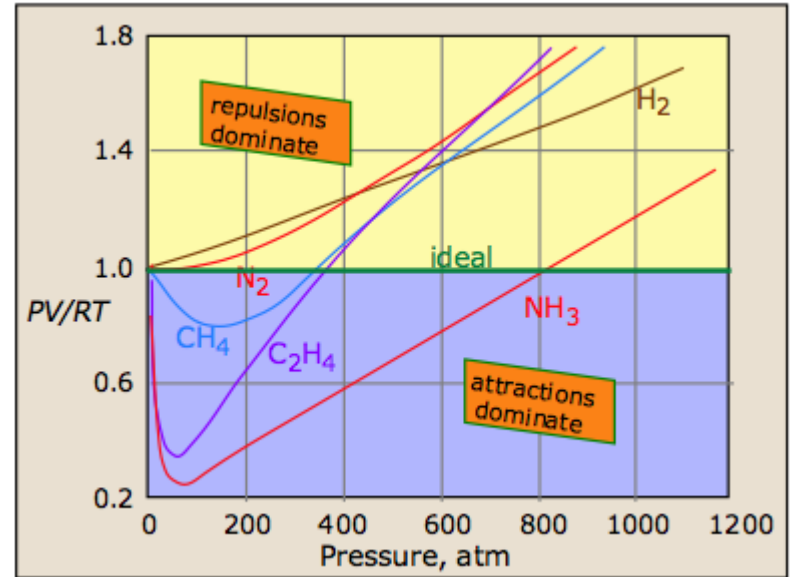
- Сили міжмолекулярної взаємодії, які виникають в результаті поляризації атомів, молекул.

Мають енергію 10-20 кДж/моль

Експериментальний прояв:

Відхилення поведінки газів від законів ідеального газу;

Наявність фазових переходів у інертних газів.



Види:

- 1) Дисперсійні сили (взаємодія між **флуктуючими диполями**)
- 2) Орієнтаційна взаємодія (взаємодія між **постійними диполями**)
- 3) Поляризаційна взаємодія (**між постійним і індукованим диполем**)

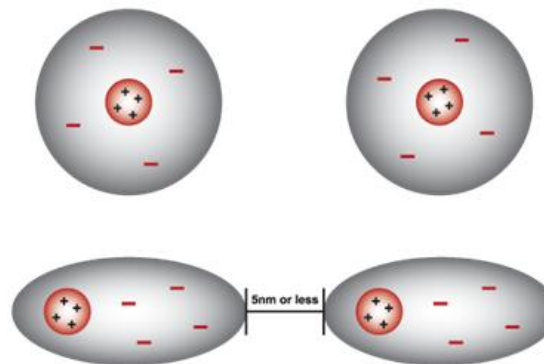
Особливості:

- 1) Анізотропія
- 2) Притягання?
Відштовхування?

Ван-дер-ваальсова взаємодія

Дисперсійні сили :

- значно слабші, ніж ковалентна взаємодія
- залежать від розміру молекули, від відстані ($\sim 1 / (r^6)$)

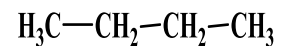


$$V = -\frac{3}{2} \frac{I_a I_b}{I_a + I_b} \frac{\alpha_a \alpha_b}{r^6}$$

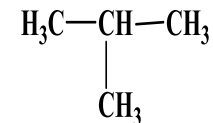
Інертні гази – температури кипіння:

He	-269°C
Ne	-246°C
Ar	-186°C
Kr	-152°C
Xe	-108°C
Rn	-62°C

Питання: Як пояснити підвищення температури кипіння при збільшенні порядкового номеру?°



Т. кип. -0.5°C



Т. кип. -11.7°C

Питання: Як пояснити різницю в температурах кипіння н-бутану і ізобутану?

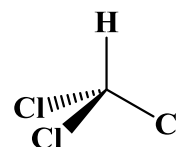
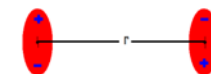
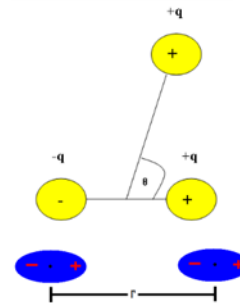
Ван-дер-ваальсова взаємодія

Диполь-дипольна взаємодія–

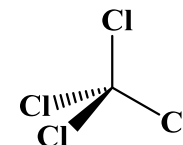
- можлива лише в полярних молекулах (на відміну від дисперсійної взаємодії, характерної для абсолютно всіх молекул).
- здатна діяти на меншій відстані, ніж дисперсійні сили ($\sim 1 / (r^3)$)
- анізотропна: залежить від взаємної орієнтації диполей

$$V = -\frac{2\mu_A\mu_B}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

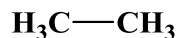
$$V = -\frac{\mu_A\mu_B}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$



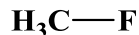
Т. кип. 61.2 °С



Т. кип. 76.8 °С



Т. кип. 184.5 К



Т. кип. 194.5 К

Питання:

- 1) Чому саме такі молекули обрано для порівняння?
- 2) Пояснити різницю в температурах кипіння. Про що може свідчити невелика різниця у температурах кипіння?

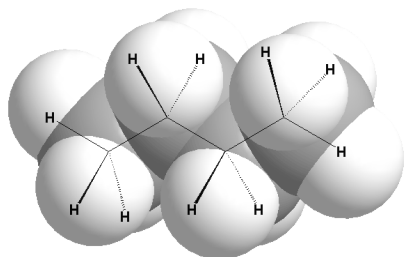
Питання:

Які види міжмолекулярної взаємодії є відповідальними за фізичні властивості в обох випадках? Чому температура кипіння другої молекули вища?

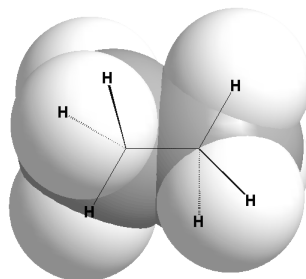
Відповідь:

Збільшення дисперсійної взаємодії може компенсувати відсутність диполь-дипольної взаємодії.

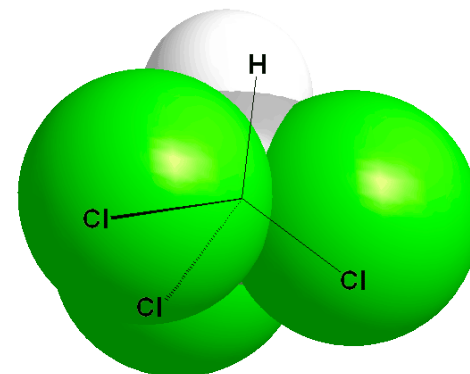
Міжмолекулярна взаємодія



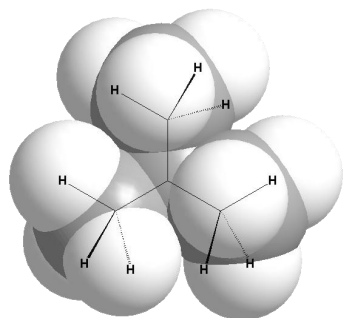
Т. кип. -0.5°C



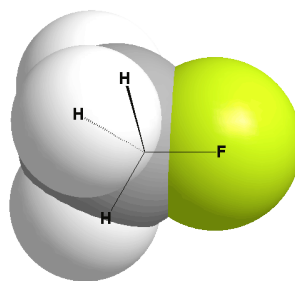
Т. кип. -89°C



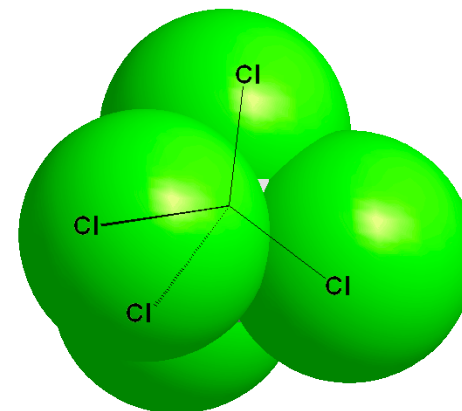
Т. кип. 61.2°C



Т. кип. -11.7°C



Т. кип. -78.4°C



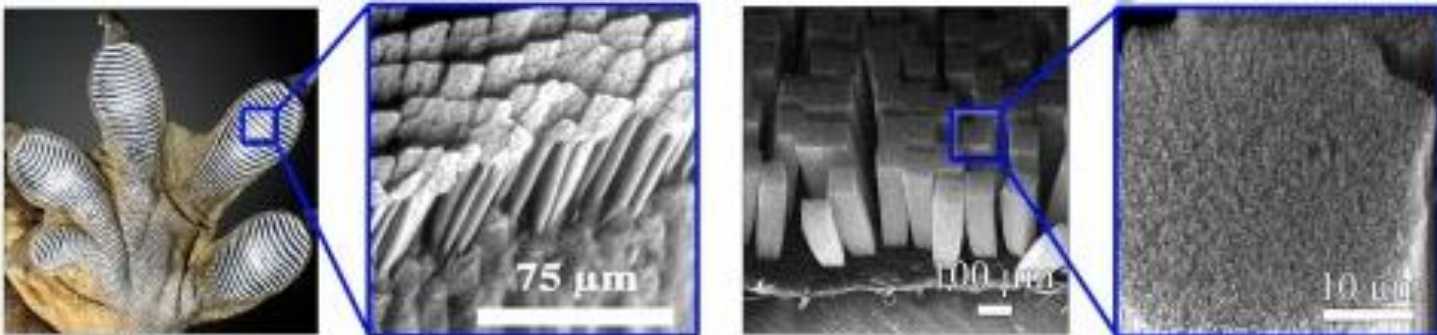
Т. кип. 76.8°C

Ван-дер-ваальсова взаємодія у природі і штучні матеріали на основі даного ефекту:

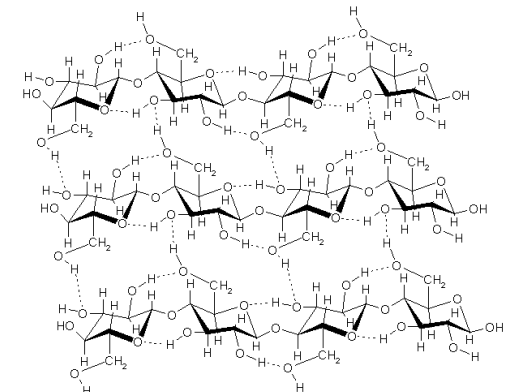
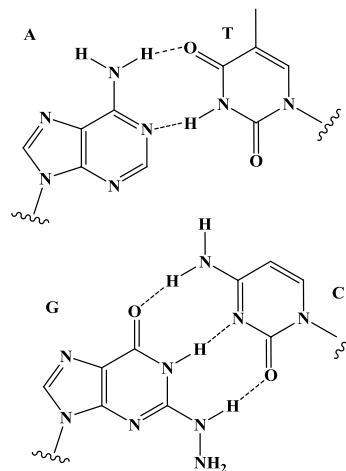
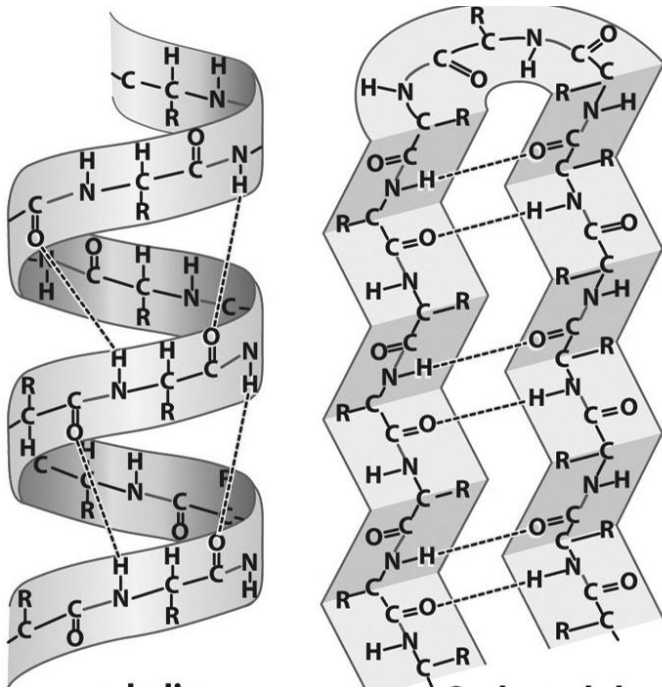
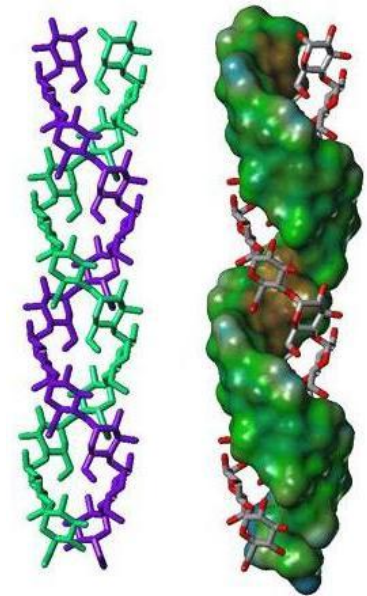
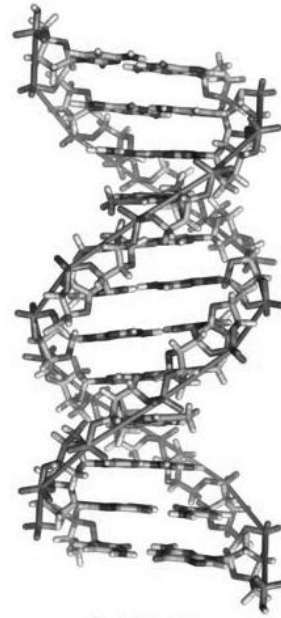
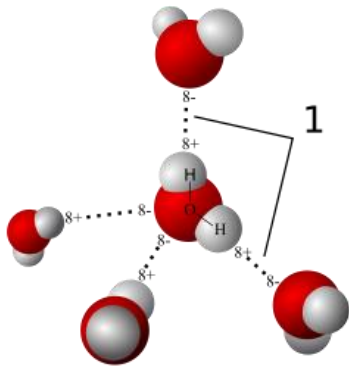


Da Vinci Learning: Природа и техника - магия движения

[Offline](#) [Online](#)



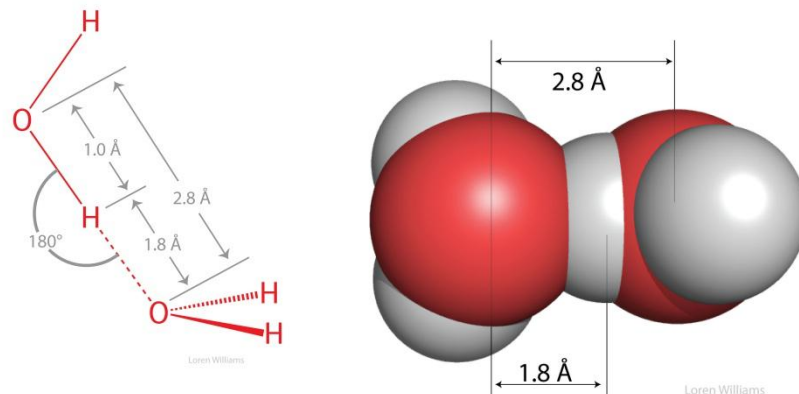
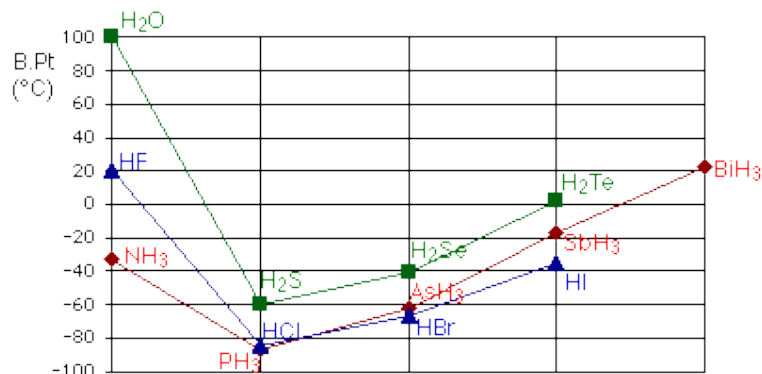
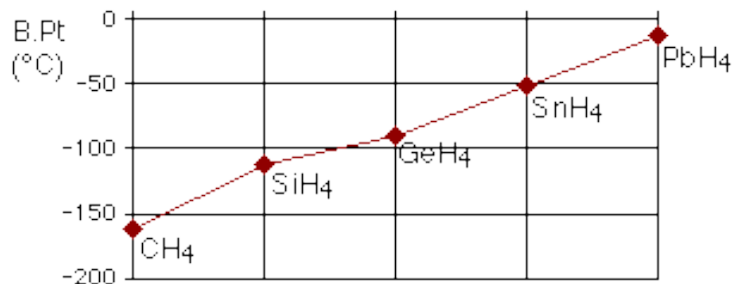
Водневий зв'язок



Водневий зв'язок

Особливий вид зв'язку, який виникає у фрагменті Х-Н...У, де Х, У – електронегативні атоми.

Експериментальні свідчення існування водневого зв'язку:



Природа водневого зв'язку:

- 1) Електростатична складова
- 2) Складова переносу заряду (довжина зв'язку дещо менша, ніж сума ВДВ радіусів)

$$E = -\frac{q_1 q_2}{r} + 2 \sum_{i,j} \frac{c_i^2 c_j^2}{E_i - E_j} \beta_{ij}$$

Енергія водневого зв'язку:

F—H...:F (161.5 кДж/моль)

O—H...:N (29 кДж/моль)

O—H...:O (21 кДж/моль)

N—H...:N (13 кДж/моль)

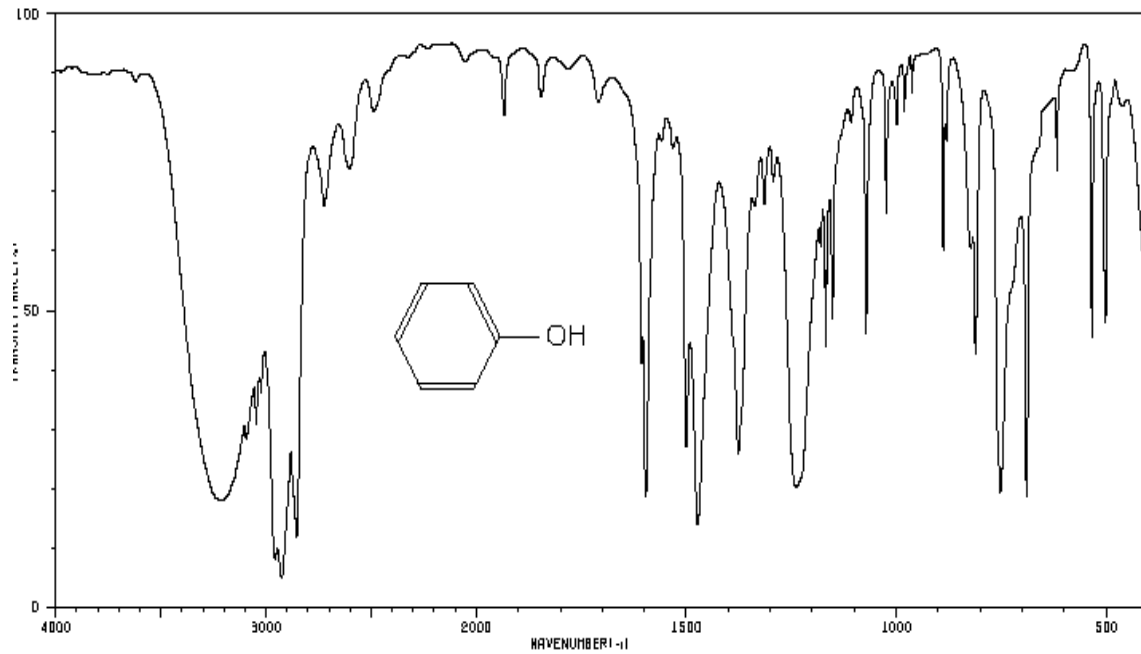
N—H...:O (8 кДж/моль)

Водневий зв'язок

	Міцний	Помірний	Слабкий
Енергія, кДж / моль	60 - 170	17 - 60	< 17
Співвідношення між-ядерних відстаней	$A...H \approx H-B$	$A...H > H-B$	$A...H \gg H-B$
Фізична природа	Ковалентний (в більшій мірі)	Електростатичний (в більшій мірі)	Електростатичний
Кут $A...H-B$, °	175-180	130-180	90-150
Приклади	$F(-) \dots H-F$	$O \dots H-O$ $N \dots H-O$	$N \dots H-N$ $O \dots H-S$

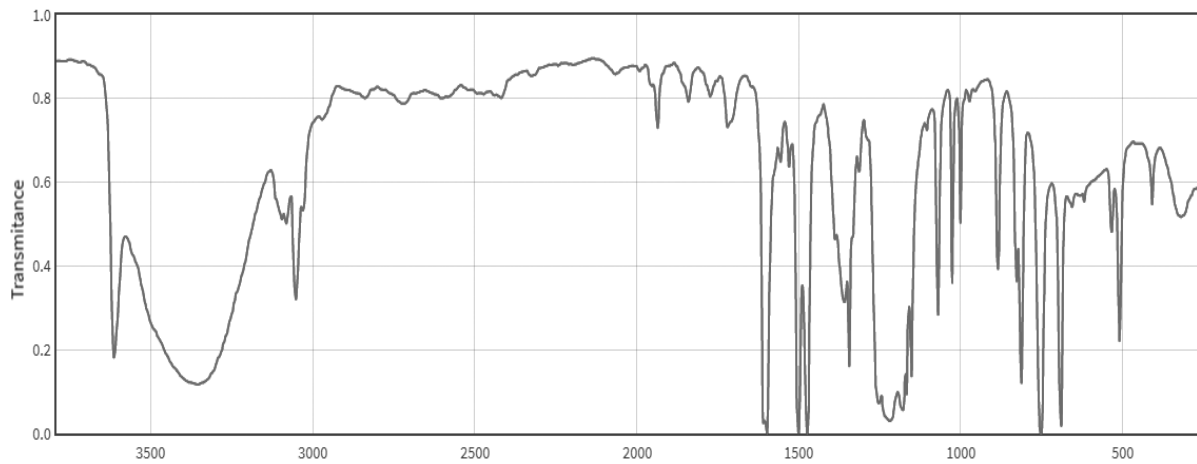
Спектральний прояв водневого зв'язку.

ІЧ спектр:



A – тверда фаза

B – 10% розчин у CCl₄



Спектральний прояв водневого зв'язку. Спектри ПМР



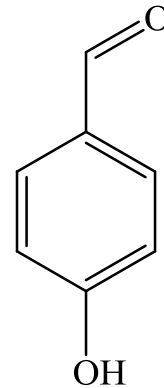
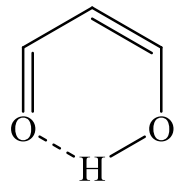
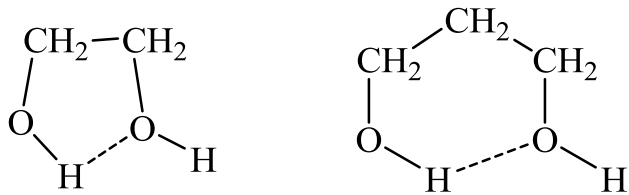
Етанол:

A – чиста рідина

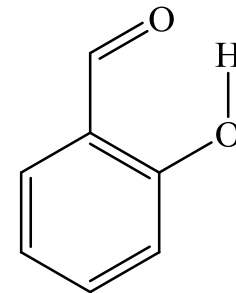
B – 5% розчин у CCl_4

Внутрішньомолекулярний водневий зв'язок

Можливий, якщо в результаті внутрішньомолекулярної асоціації утворюється **шести- або п'ятичленний** цикл.



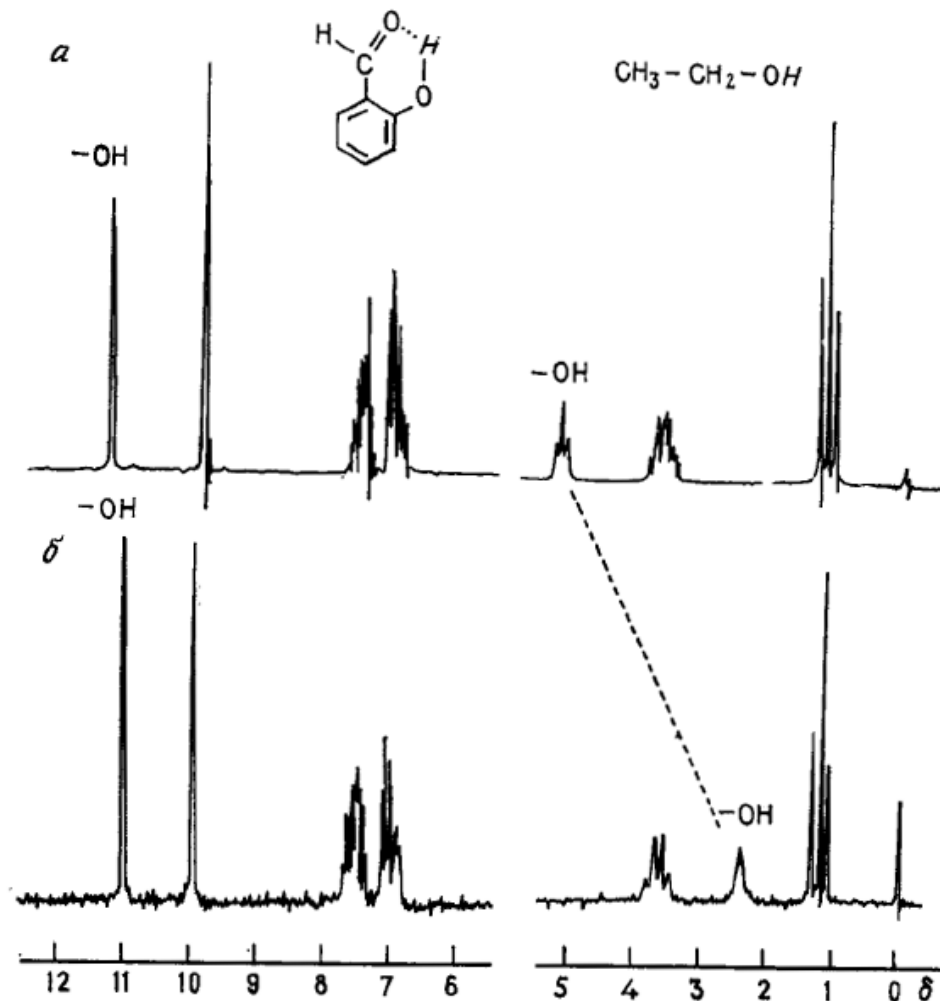
Т. пл. 112 °С



Т. пл. -7 °С

Сполуки зазвичай мають нижчі порівняно зі сполуками з міжмолекулярним водневим зв'язком) температури плавлення і кипіння.

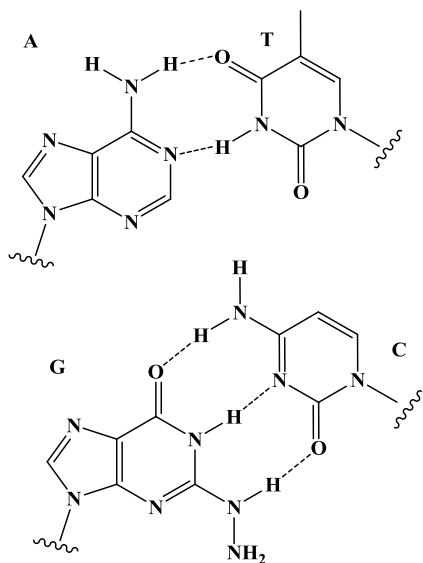
Спектральный прояв внутрішньомолекулярного водневого зв'язку



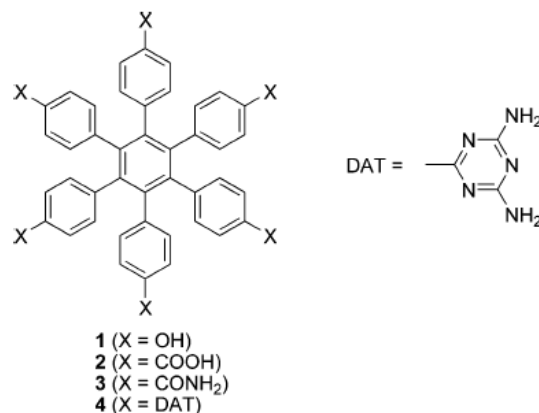
Концентрационные зависимости резонансных частот гидроксильных протонов салицилового альдегида и этанола для чистых жидкостей (а) и 5 %-ных растворов в CCl_4 (б).

Водневий зв'язок як фактор молекулярної самоорганізації

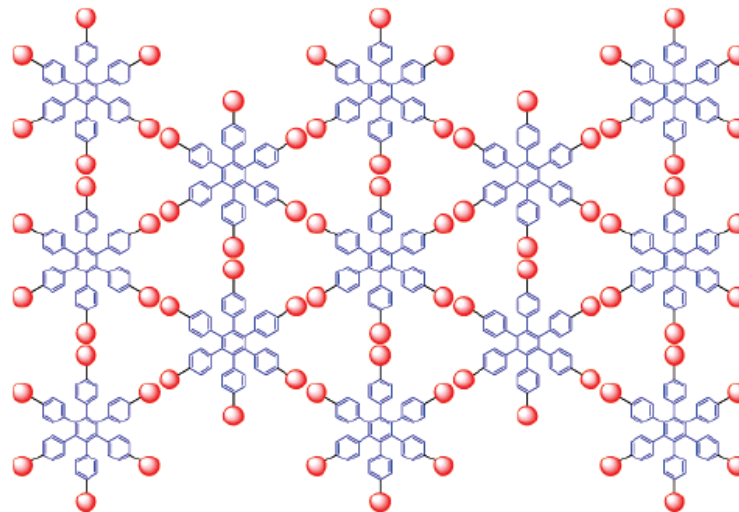
Інженерія кристалів (**crystal engineering**) – розробка і синтез нових кристалічних структур з заданими властивостями на основі розуміння принципу молекулярної самоорганізації і природи міжмолекулярної взаємодії.



Супрамолекулярні синтони:



Структура кристалічного матеріалу:



Гідрофобна взаємодія



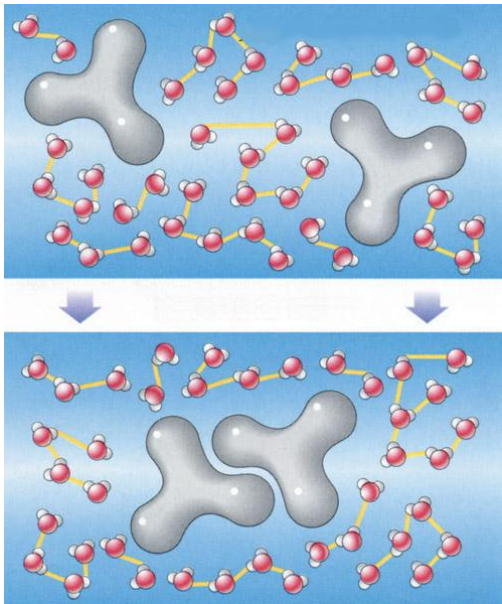
«Ефект лотоса»:

<https://www.youtube.com/watch?v=MFHcSrNRU5E>

[Offline video here](#)

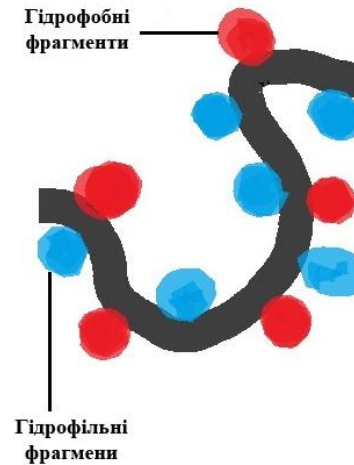
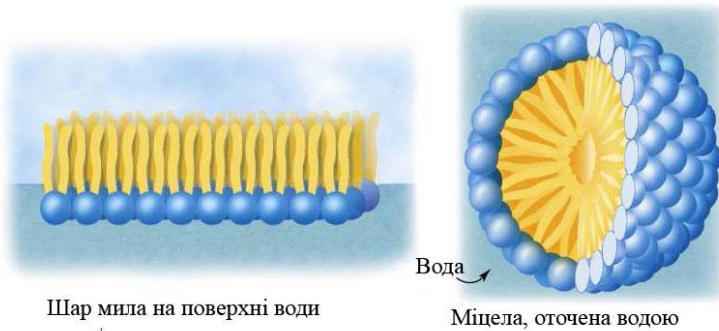
Причини гідрофобності поверхні:

- 1) Молекулярная структура;
- 2) Надмолекулярная структура;
- 3) Мікроструктура.

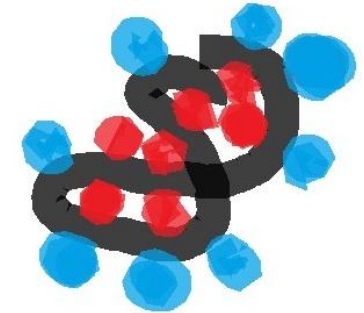


Гідрофобна взаємодія – дестабілізуюча взаємодія у водному середовищі між молекулами води і гідрофобом (неполярною молекулою, зазвичай з довгим карбогідратним ланцюгом).

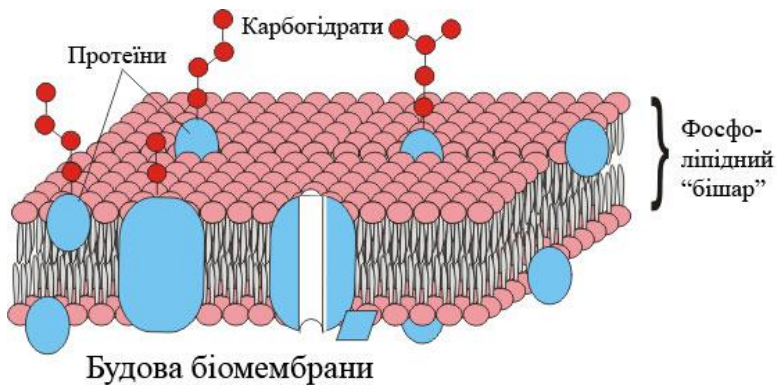
Гідрофобна взаємодія



Ізольований протеїн



Протеїн у водному середовищі



Гідрофобна взаємодія – дестабілізуюча взаємодія у водному середовищі між молекулами води і гідрофобом (неполярною молекулою, зазвичай з довгим карбогідратним ланцюгом).

Отримання наночастинок золота та їх функціоналізація додекантіолом:

[Matthew N. Martin, James I. Basham, Paul Chando and Sang-Kee Eah // Langmuir, 2010, 26 \(10\), pp 7410–7417](#)

<https://www.youtube.com/watch?v=nqkwM9o1s-w>;
[Offline video here.](#)



Monolayer-Protected Gold Nanoparticles: Ultra-Fast Synthesis & Ultra-Simple 2D Self-Assembly

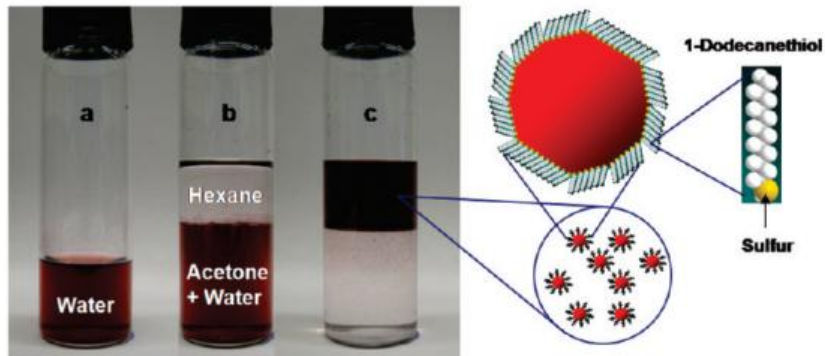
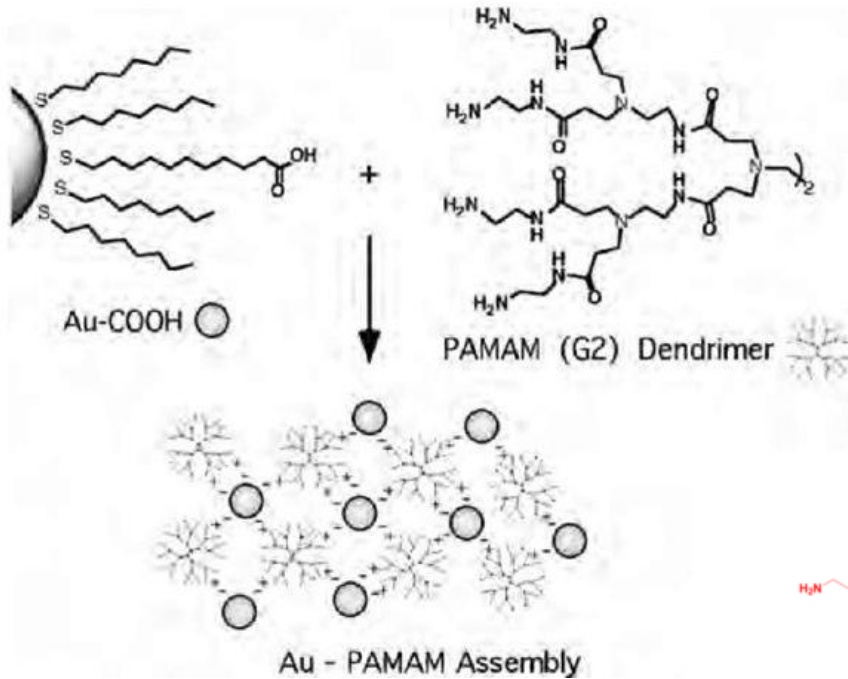
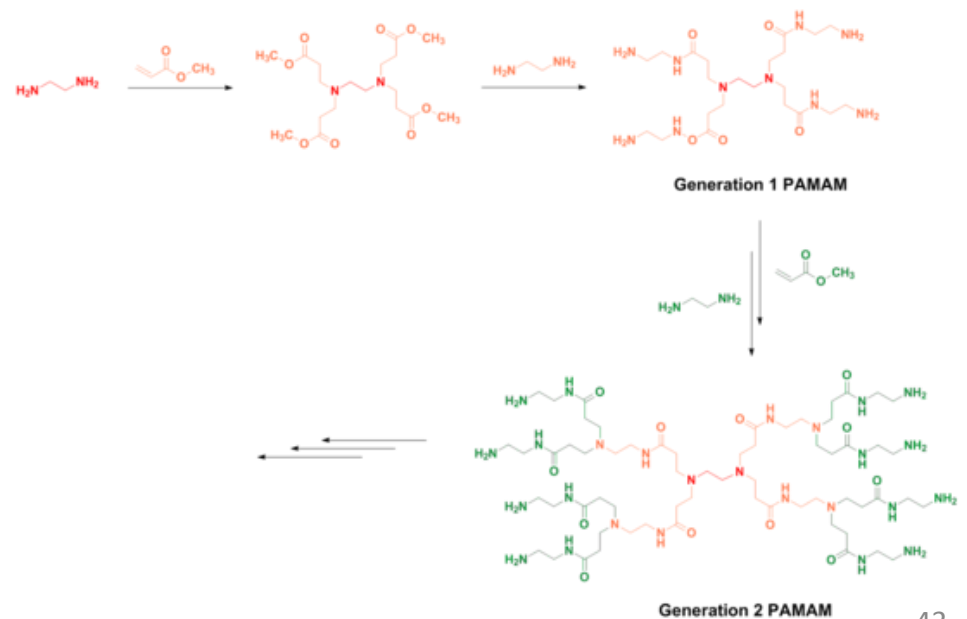


Figure 1. Gold nanoparticles are (a) made in water, (b) mixed with acetone, and (c) phase-transferred to hexane with DDT molecules simply by shaking the vial. The whole synthesis takes less than 10 min and does not need a cleaning step, since all reaction byproducts remain in the water–acetone phase.

<http://what-when-how.com/nanoscience-and-nanotechnology/polymer-mediated-self-assembly-of-nanoparticles-part-2-nanotechnology/>



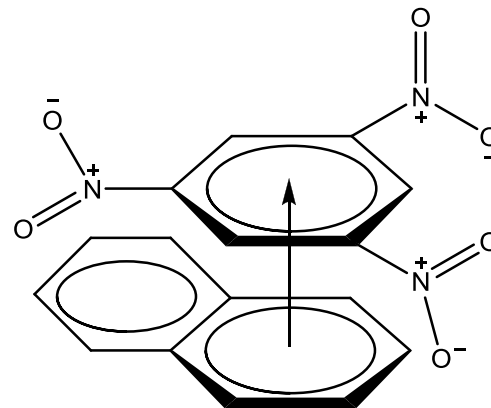
(PAMAM = Polyamidoamine)



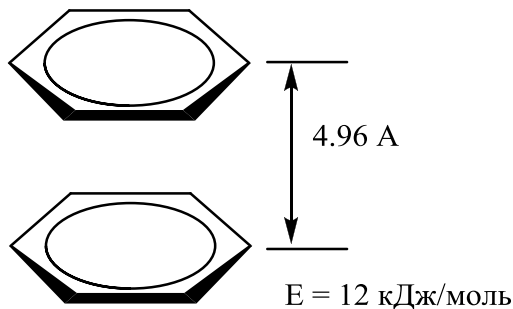
π-СТЕКІНГ

– стабілізуюча нековалентна взаємодія між π-системами (головним чином, ароматичними циклами);

Енергія – до 50 кДж / моль



π-комплекс – різновид комплексу з переносом заряду.



Приклад π-комплексу:

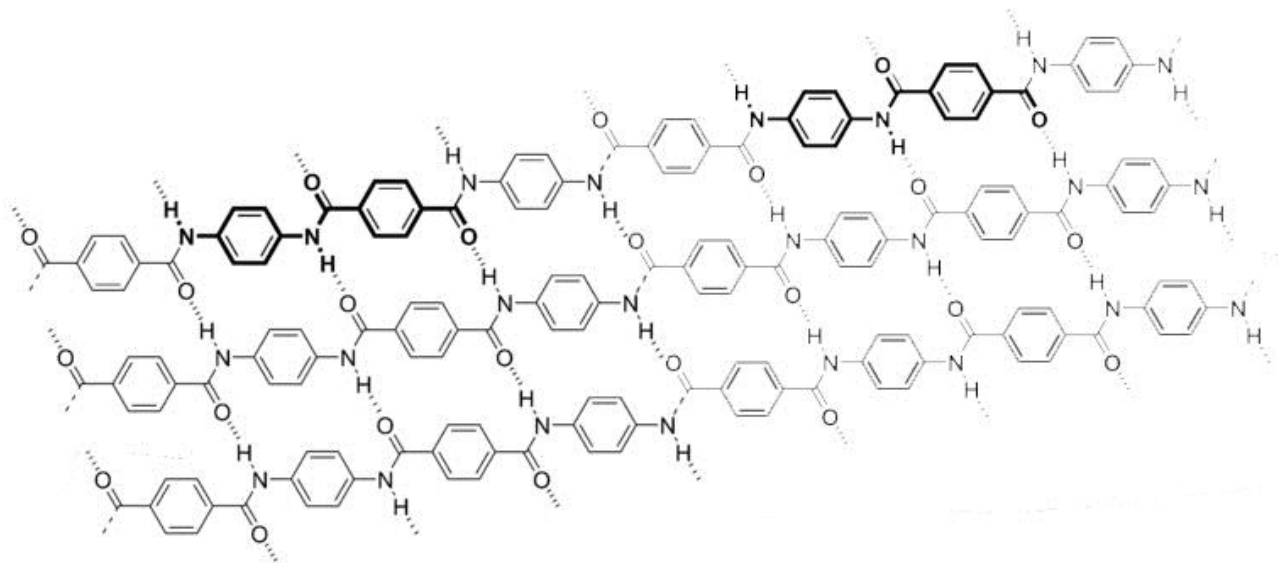
Т. пл. 164 °С, кип. 315 °С (760 мм рт. ст.);
колір -**червоний**

Нафталін – **безкольоровий**

1,3,5-тринітробензол – **світло-жовтий**

Питання: Як пояснити зміну кольору?

π-СТЕКІНГ



Кевлар:

Т. розкл. 430-480 °С, густина 1.44

Зберігає міцність від -160 °С до +150 °С

Міцність зумовлена:

1. Молекулярною структурою (ковалентними зв'язками);
2. Надмолекулярною структурою (водневі зв'язки, π-стекінг).

