

УДК 541.64

## ФОРМИРОВАНИЕ НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР ИЗ ЖЕСТКОЦЕПНЫХ ПОЛИАНИОНОВ

П.В. Комаров<sup>1,2</sup>, В.А. Иванов<sup>3</sup>

Тверской государственной университет

<sup>1</sup>Кафедра теоретической физики

<sup>2</sup>ИНЭОС РАН, г. Москва

<sup>3</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Физический факультет, Отделение физики твердого тела,

Кафедра физики полимеров и кристаллов

*Рассмотрены особенности процессов самоорганизации в водных растворах стержнеобразных полианионов в присутствии стержнеобразных коротких поликатионов.*

**Ключевые слова:** полиэлектролиты, самосборка, Монте-Карло

**Введение.** К важной особенности полиэлектролитов относят явление самосборки – спонтанного/управляемого усложнения молекулярных структур, приобретающих в ходе этого процесса новые свойства. Процесс самосборки реализуется за счет дальнедействующего электростатического взаимодействия (обеспечивающего сближение заряженных молекул и их фрагментов) и короткодействующих межмолекулярных сил (способствующих стабилизации образующихся агрегатов). В результате в растворах могут возникать высокоорганизованные сложнофункциональные супрамолекулярные агрегаты. Считается, что именно феномен самосборки явился главной предпосылкой появления жизни и играет определяющую роль в жизнедеятельности живых систем. Кроме этого, многие структуры, изучаемые супрамолекулярной химией (например, гели), формируются посредством процесса самосборки. Можно сказать, что «инструкции» для формирования объектов с надмолекулярной организацией «закодированы» в строении исходных молекул. В соответствии с современными концепциями существуют два пути реализации самосборки в растворах ПЭ [1; 2] использование: макромолекул с ионогенными группами и использование сурфактантов.

В настоящее время самосборка в растворах полиэлектролитов рассматривается в качестве одного из методов получения наноструктур, наноматериалов по так называемой технологии «снизу-вверх». Для ее реализации необходимо решить следующие задачи: 1) выбрать конструктивные элементы; 2) задать их свойства таким образом, чтобы элементы были способны к упорядочению с образованием заданной структуры; 3) выбрать оптимальные условия (параметры среды, ее состав), при которых возможна реализация процесса самосборки.

Перспективными строительными блоками для создания наноразмерных агрегатов являются так называемые жесткоцепные полиэлектролиты. К ним относятся макромолекулы с ионогенными группами, которые в растворах приобретают сильно вытянутые конформации в сравнении с конформацией статистического клубка, свойственной обычным полимерам. В некоторых случаях, когда размер молекулы сопоставим с длиной сегмента Куна, говорят, что молекула имеет стержнеобразную конформацию. Стержнеобразные строительные блоки могут быть получены из фрагментов молекул дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК), рибонуклеиновой кислоты (РНК), F-актина, а также поверхностно модифицированных углеродных нанотрубок, нитеобразных бактериофагов и других наноразмерных объектов. Благодаря простой геометрии, ярко выраженным полиэлектролитным свойствам и хорошо разработанной технике манипулирования стержнеобразные полиэлектролиты наиболее часто используются в качестве экспериментальных и теоретических систем для изучения процессов самосборки [3–15].

В присутствии многовалентных контр/макро ионов фазовое поведение стержнеобразных ПЭ становится достаточно сложным благодаря возникновению короткодействующего притяжения вследствие эффекта перезарядки, вызванного агрегацией контрионов. Посредством введения дополнительного низкомолекулярного электролита в раствор можно управлять конкуренцией между дальнедействующим отталкиванием одноименно заряженных полиионов и индуцированным контрионами короткодействующим притяжением. Это позволяет формировать различные пространственные упорядочения из жесткоцепных молекул [16–19].

Однако многие вопросы в этой области являются нерешенными, например влияние строения макроионов на морфологию возникающих агрегатов, выбор оптимального способа манипулирования готовыми агрегатами. Также актуальной задачей является разработка теоретических методов, направленных на предсказание эволюции полиэлектролитных систем.

Среди теоретических подходов, с успехом применявшихся при описании разбавленных растворов полиэлектролитов и особенностей конформационного поведения отдельных заряженных макромолекул, прежде всего следует упомянуть скейлинговые теории [20; 21]. Для полуразбавленных растворов успешно применяются традиционные методы статистической физики. Здесь следует отметить предложенный Борю и Ерухимовичем способ описания корреляций в растворе гибкоцепного полиэлектролита в приближении случайных фаз и на основе метода среднего поля [22]. Полученное ими выражение для структурного фактора в настоящее время успешно применяется при

анализе экспериментальных кривых интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов на растворах полиэлектролитов. С использованием данной теоретической модели был проведен подробный анализ фазового поведения растворов слабозаряженных ПЭ в различных режимах [22–29].

Кроме перечисленных выше методов, используемых для описания равновесных свойств растворов полиэлектролитов, хорошо себя зарекомендовали микроскопические подходы, основанные на теории интегральных уравнений жидкого состояния и обобщении теории интегральных уравнений жидкого состояния на полимерный случай – так называемое PRISM-приближение (Polymer Reference Interaction Site Model) [24–29]. Безусловным преимуществом этого метода является возможность изучения растворов полиионов с большими молекулярными массами, исходя лишь из деталей химического строения молекул и заданных потенциалов взаимодействия их звеньев.

Сравнение результатов расчетов, выполненных в рамках PRISM-приближения и прямого компьютерного моделирования на основе метода Монте-Карло (МК) для сильнозаряженных стержнеобразных молекул с явным учетом контрионов, показывает, что при температурах ниже порога Маннинга теория интегральных уравнений не обеспечивает точного количественного согласия с результатами прямого компьютерного моделирования [30]. В работе [30] показано, что причиной падения точности PRISM-приближения в области низких температур является образование локально анизотропных структур с ЖК-упорядочением.

Как известно, взаимодействие полиэлектролитов с мультивалентными контрионами может сопровождаться процессом формирования различных агрегатов. Было установлено, что некоторые биополимеры в присутствии мультивалентных контрионов могут конденсироваться в водорастворимые агрегаты, называемые *пучками*. Это явление наблюдается для длинных и коротких фрагментов молекул ДНК, для молекул F-актина, углеродных нанотрубок, fd-вирусов и т.д. Наиболее сложные агрегаты могут быть получены в растворах упомянутых выше анионных полиэлектролитов в присутствии различных катионных сополимеров (в частности, диблочных полиэлектролитов, катионных сурфактантов и т.д.). В зависимости от концентрации противоположно заряженных сополимеров, гибкости цепей полианионов было обнаружено формирование различных трехмерных структур, таких, как *сферические* и *цилиндрические* мицеллы в *кубической*, *гексагональной*, *ламеллярной* и *инвертированной гексагональной* фазах [1; 31–33]. Необходимо отметить, что в большинстве работ авторы, как правило, рассматривают агрегационные

процессы в присутствии изотропных сферических контрионов или гомогенных цепных поликонтрионов. Вместе с тем можно предположить, что химическое строение мезоскопических поливалентных контрионов может оказывать критическое влияние на конечную структуру формируемых агрегатов.

Данная работа является продолжением работ [18; 19]. В статье рассмотрены растворы, содержащие стержнеобразные полианионы в присутствии поликатионов с анизотропным распределением заряда в бессолевым разбавленном растворе, для изучения вопроса, как контролировать процесс агрегации с целью получения квазидвумерных (плоских) и других агрегатов на основе стержнеобразных полиэлектролитных молекул.

**Модель.** Рассмотрен разбавленный бессолевым раствор, содержащий стержнеобразные сильнозаряженные полианионы (подсистема *A*), которые могут быть использованы в качестве модели жесткоцепных фрагментов различных полимерных молекул, например ДНК. Также в растворе присутствуют положительно заряженные короткие цепи диблок и триблок сополимеров, состоящие из звеньев с положительным зарядом (подсистема *B*) и последовательности нейтральных звеньев (подсистема *C*), (рис. 1), где представлены все параметры изучаемой системы. Предполагается, что растворитель является непрерывной средой, характеризуемой константой диэлектрической проницаемости  $\epsilon$ . Все цепи являются гидрофильными и состоят из звеньев диаметра  $\sigma_A, \sigma_B, \sigma_C$ .

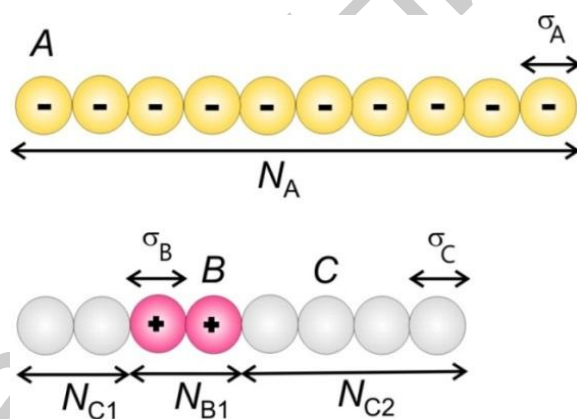


Рис. 1. Компоненты модели: *A* (полианион), *B* (заряженный силовой центр) и *C* (нейтральные блоки)

Длины полианиона и блоков поликатиона задаются числом звеньев  $N_A, N_B, N_{C1}$  и  $N_{C2}$ . Каждый мономер полианиона несет на себе заряд  $q_i^A = Z_i^A |e|$ ,  $Z_i^A < 1$ . Заряженный мономер катионной цепи имеет такой же заряд противоположного знака  $q_i^B = Z_i^B |e|$  ( $Z_i^B > 1$ ), т.е.  $|Z_i^A| = Z_i^B = Z$ . Для подсистемы *C* предполагается  $q_i^C = 0$

( $Z_i^C = 0$ ). Среднечисленная плотность полианионов составляет  $\rho_A = 0.001$  (разбавленный раствор). В соответствии с условием электронейтральности имеем  $\rho_B = \rho_A$ ,  $\rho_C = (N_{C1} + N_{C2})\rho_A$ . Таким образом, полное число силовых центров в системе  $N = n_A N_A (N_{C1} + N_{C2} + N_B + 1)$ , где  $n_A \equiv L$  – число полианионных цепей.

Полная потенциальная энергия молекул представляет собой сумму короткодействующего отталкивающего потенциала (потенциала “мягких” сфер) и кулоновского потенциала:

$$U = \sum_{\substack{i,j,i \neq j \\ \alpha,\beta}} k_B T_0 \left( \frac{\sigma}{r_{ij}^{\alpha\beta}} \right)^{12} + \sum_{\substack{i,j,i \neq j \\ \alpha,\beta}} k_B T_0 \frac{\gamma}{r_{ij}^{\alpha\beta}}, \quad (1)$$

где  $r_{ij}^{\alpha\beta} = |\mathbf{r}_i^\alpha - \mathbf{r}_j^\beta|$  – расстояние между несвязанными частицами  $i$  и  $j$  ( $\alpha, \beta = A, B, C$ ),  $\gamma / \sigma = Z^2 e^2 / 4\pi\epsilon_0 \epsilon k_B T_0$  ( $T_0 = 298\text{K}$ ) – параметр зацепления (длина Бьеррума, умноженная на  $Z^2$ ). В расчетах  $\gamma$  варьировалась в диапазоне от 1 до 100. Исходя из факта, что длина Бьеррума для воды при нормальных условиях  $\sim 7.1\text{\AA}$ , в расчетах подразумевается, что заряд у силовых центров  $A$  и  $B$  варьируется от 1 до 10, т.е.  $Z = 1$  для  $\Gamma = 1$  и  $Z = 10$  для  $\Gamma = 100$ . Кроме того, очевидно, что изменение  $\gamma$  может быть связано с изменением температуры среды  $T$ , и как изменение диэлектрической проницаемости растворителя  $\epsilon$ . Отметим, что при  $\gamma \rightarrow \infty$  упорядочение и агрегация полиионов усиливают локальную анизотропию системы, что является дополнительными источниками отклонений результатов, получаемых с помощью теории PRISM от расчетов методом Монте-Карло [30]. Таким образом, в режиме сильной агрегации теория интегральных уравнений становится не работоспособной.

Моделирование производилось методом МК в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Длина ребра ячейки выбиралась исходя из сохранения среднечисленной плотности для полианионов  $\rho_A = 0.001$ . Как и в [18; 19; 30] для реализации модели была использована стандартная схема Метрополиса [34]. Для правильного учета энергетического вклада дальнедействующего кулоновского потенциала использовалась техника суммирования Эвальда [35]. Для каждого набора параметров расчета было выполнено как минимум 200000МК шагов расчетной схемы, после того, как система переходила в равновесное состояние.

Для изучения структурных характеристик модельной системы было рассмотрено поведение парциальных статических структурных факторов для полианионов и поликатионов  $S_\alpha(q)$ ,  $\alpha = A, B$ .

Для оценки степени упорядочения в системе рассчитывался параметр порядка  $\Lambda$ . Он равен максимальному элементу  $\lambda_{\tau\nu}$  диагональной матрицы:

$$\lambda_{\tau\nu} = \frac{1}{2n_A} \sum_{l=1}^{n_A} \left[ 3 \frac{b_{l,\tau} b_{l,\nu}}{b_l^2} - \delta_{\tau\nu} \right], \quad (2)$$

где  $\tau, \nu = x, y, z$ ;  $b_{i,\tau}$  и  $b_{i,\nu}$  – проекции полианиона с номером  $i$  на оси  $\tau$  и  $\nu$  соответственно;  $\delta_{\tau\nu}$  – символ Кронекера.

**Результаты.** Поскольку химическое строение мезоскопических поливалентных контрионов оказывает критическое влияние на конечную структуру формируемых агрегатов [18; 19], можно утверждать, что структура поликатионов является средством управления пространственной структурой агрегатов, формируемых стержнеобразными полиэлектролитами в водном растворе.

В рамках сформулированной модели были рассмотрены две системы, содержащие одинаковое число силовых центров одинакового диаметра  $\sigma_A = \sigma_B = \sigma_C = 1$ . Число полианионов  $L = 12$ , а число СЦ у аниона  $N_A = 10$ . В качестве поликатионов рассмотрим молекулы из трех СЦ с одним заряженным центром, причем в первом случае он является концевым ( $N_B = 1, N_{C1} = 0, N_{C2} = 2$ ), а во втором – располагается в середине ( $N_B = 1, N_{C1} = 1, N_{C2} = 1$ ). Таким образом, поликатионы можно условно представить как *BCC* и *CBC*, в порядке следования их силовых центров. Будем полагать, что силовые центры  $A$  и  $B$  на полианионе и поликатионе несут одинаковые заряды противоположного знака. Величина заряда регулируется параметром  $Z$ , а  $\gamma$  выступает в качестве силовой константы, регулирующей силу электростатического взаимодействия.

На рис. 2 показаны зависимости параметра ориентационного порядка (2) для систем с поликатионами вида *BCC* и *CBC*. Для асимметрично заряженных поликатионов полученная зависимость  $\Lambda(\gamma)$  имеет тот же вид, что и для лентообразных агрегатов в случае  $L = 9$  [19]. Положения порогового значения  $\gamma_T \sim 30\sigma$ , отвечающего переходу подсистемы полианионов из хаотического в агрегированное высокоупорядоченное состояние, также совпадают. В случае симметричных поликатионов *CBC* вид  $\Lambda(\gamma)$  сильно изменяется. Как видно из рисунка, окончательный переход системы из хаотического в упорядоченное состояние, на достигнутых временах моделирования (1000000МК шагов), происходит при больших значениях  $\gamma \geq 80\sigma$ . В области  $\gamma$  от  $\sim 30\sigma$  до  $\sim 70\sigma$  наблюдается постепенный рост параметра порядка. Можно предположить, что для завершения перехода не достаточно выбранного времени моделирования.

Визуализация конечного состояния показывает, что в системе,

содержащей асимметричные поликатионы, возникают правильные лентообразные агрегаты (рис. 3). Интересно, что в случае симметричных поликатионов возникают агрегаты «8»-образной морфологии. Это можно объяснить тем, что облако сконденсированных поликатионов стремится организовать таким образом, что тройки катионов образуют равнобедренный треугольник в плоскости, перпендикулярной к полианиону (рис. 4). В результате стерического взаимодействия облаков конденсированных поликатионов полианионы стыкуются таким образом, что формируемая ими поверхность загибается на угол  $60^\circ$  и формируется цилиндрический агрегат из 6 молекул. Очевидно, что специфика формируемого облака из сконденсированных поликатионов влияет на процесс слияния полианионов. Также можно отметить, что благодаря специфике выравнивания поликатионов формируемые агрегаты приобретают большую жесткость, что проявляется в более высоком, чем в случае лентообразных агрегатов, значении параметра порядка в конечном состоянии для  $\gamma > 80\sigma$ . Как видно из рис. 3,  $\Lambda \sim 1$ , т.е. полианионы в агрегате располагаются практически параллельно друг другу.

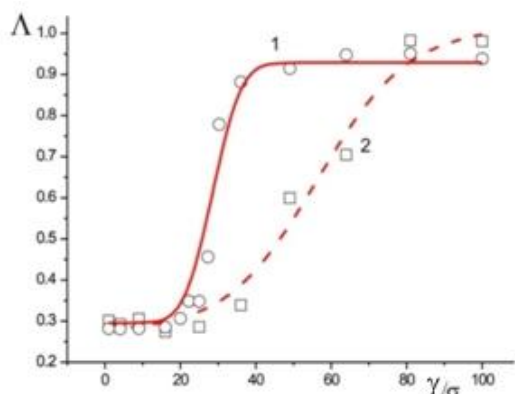


Рис. 2. Параметр порядка в зависимости от параметра зацепления для системы из  $L = 12$  ( $N_A = 10$ ) стержнеобразных полианионов и поликатионов с  $N_B = 1$ . 1)  $N_{C1} = 0$ ,  $N_{C2} = 2$ , 2)  $N_{C1} = 1$ ,  $N_{C2} = 1$

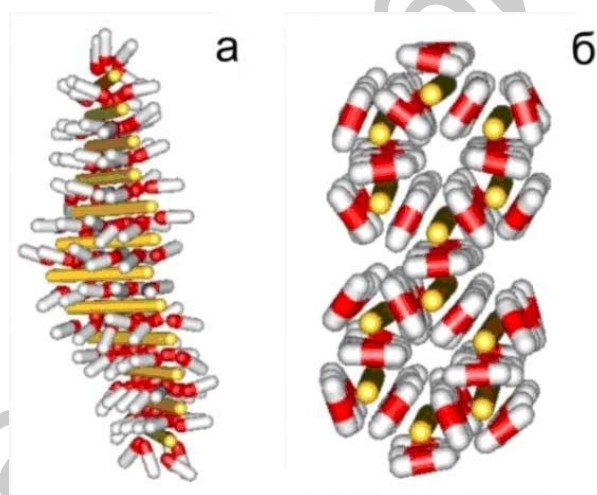


Рис. 3. Визуализация конечных состояний систем из  $L = 12$  ( $N_A = 10$ ) стержнеобразных полианионов и поликатионов структуры: а – ВСС, б – СВС. Поликатионы показаны желтым цветом, заряженные и нейтральные СЦ на поликатионах соответственно красным и белым

Как и в случае исследования лентообразных агрегатов в [18; 19], для изучения термодинамической стабильности конечного состояния была рассчитана средняя потенциальная энергия систем при  $\gamma = 100 \sigma$  по достижении 1000000 МК шагов моделирования (см. рис. 4). Использовались несколько начальных конфигураций: *i*) лентообразная, *ii*) двойной слой, *iii*) пучок и *iv*) цилиндр.

В случае поликатионов вида *BCC* лентообразное конечное состояние обладает наименьшей потенциальной энергией. Очевидно (см. рис. 4), что дальнейший ход эволюции в случае асимметричных поликатионов должен развиваться по направлению постепенной трансформации агрегатов к лентообразной морфологии.

Для поликатионов *CBC* наименьшей энергией обладают агрегаты в виде цифры "8". Агрегат, получившийся из начальной конфигурации (*ii*), практически завершил свою трансформацию. В остальных случаях агрегаты еще остаются в состоянии структурной перестройки. Следует отметить, что такая трансформация является достаточно длительным процессом, поскольку значение энергии для конечного состояния агрегата в виде "змейки Рубика" является близким к значению энергии для наиболее энергетически выгодного состояния.

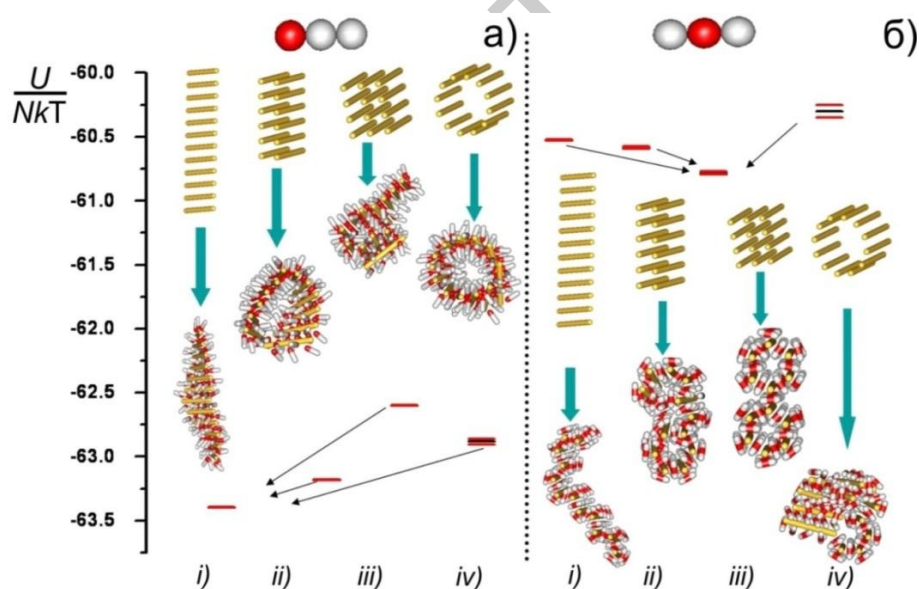


Рис. 4. Сравнение средней удельной потенциальной энергии конечных состояний систем при достижении 1,000,000МК шагов моделирования. На рисунке показаны различные начальные упорядочения полианионов [(*i*) лентообразное, (*ii,iii*) пучок, (*iv*) цилиндрическое] и примеры конечных состояний. а) В системе присутствуют катионные цепи вида *BCC*, и б) *CBC*.  $L = 9$ ,  $\rho_A = 0.001$  и  $\gamma = 100\sigma$ . Черными линиями показаны значения потенциальной энергии, красными линиями показаны интервалы ошибки вычисления энергии. Черными стрелками показаны предполагаемые направления эволюции систем



Это означает, что дальнейшая трансформация возможна в результате накопления температурных флуктуаций. Также следует отметить более низкое по модулю значение энергии для наиболее энергетически выгодных агрегатов в случае *СВС* поликатионов в сравнении со случаем *ВСС* поликатионов.

Очевидно, что это является следствием особенностей стерического взаимодействия между нейтральными хвостами поликатионов. В заключение приведем иллюстрацию влияния числа полианионов  $L$  на морфологию конечного состояния системы (рис. 5).

**Выводы.** В результате выполненных исследований было установлено, что в бессолево разбавленном растворе жесткоцепных полианионов в присутствии коротких катионных цепей по достижению пороговых значений параметра зацепления  $\gamma_T$  в системе могут спонтанно формироваться стабильные лентообразные и цилиндрические агрегаты.

Полученные результаты могут быть использованы для получения упорядоченных массивов из различных жесткоцепных макромолекул, например фрагментов молекул ДНК. Кроме того, полученные результаты являются вкладом в разработку теоретических основ управляемой самосборки наноразмерных конструктивных блоков.

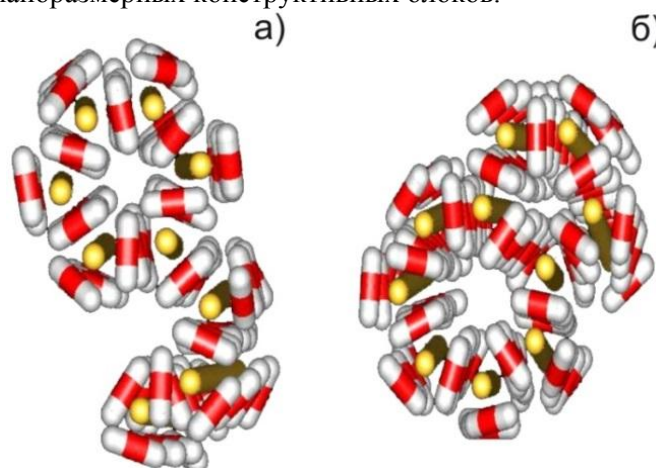


Рис. 5. Визуализация конечных состояний систем из а)  $L=9$  и б)  $L=10$  стержнеобразных полианионов ( $N_A=10$ ) и поликатионов с  $N_B=1$ ,  $N_{C1}=1$  и  $N_{C2}=1$ . Поликатионы показаны желтым цветом, заряженные и нейтральные СЦ на поликатионах соответственно красным и белым

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-03-91334-ННIO-а).*

### Список литературы

1. Kotz J., Kosmella S., Beitz T. // *Prog. Polym. Sci.* 2001. V.26, № 8. P. 1199–1231.
2. Dobrynin A.V. // *Current Opinion in Colloid & Interface Science.* 2008. V.13, № 6. P. 376–388.
3. Angelini T.E., Liang H., Wriggers W., Wong G.C.L. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2003. V.100, № 15. P. 8634–8637.
4. Tang J.X., Janmey P.A. // *J. Biol. Chem.* 1996. V. 271, № 15. P.8556–8563.
5. Tang J.X., Wong S., Tran P.T., Janmey P.A. // *Ber. Buns. Ges. Phys. Chem.* 1996. V. 100, № 6. P. 796–806.
6. Needleman D.J., Ojeda-Lopez M.A., Raviv U., Miller H.P., Wilson L., Safinya C.R. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* 2004. V. 101, № 46. P. 16099–16103.
7. Tang, J., Wong S., Tran P., Janmey P. Cation induced bundle formation of rodlike polyelectrolytes // *Ber. Bunsen-Ges. Phys. Chem.* 1996. V. 100. P. 796–806.
8. Ray J., Manning G. // *Langmuir.* 1994. V. 10, № 7. P. 2450–2461.
9. Grønbech-Jensen N., Mashl R., Bruinsma R., Gelbart W.M. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78, № 12. P. 2477–2480.
10. Stevens M.J. // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 82, № 1. P. 101–104.
11. Комаров П.В., Жеренкова Л.В., Халатур П.Г. // *Коллоидный журнал.* 2007. Т. 69, № 6. С. 706–717.
12. Komarov P.V., Zherenkova L.V., Khalatur P.G. // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128, № 12. P. 124909–11.
13. Жеренкова Л.В., Комаров П.В., Халатур П.Г., Хохлов А.Р. // *Доклады академии наук.* 2008. Т. 421, № 4. С. 502–505.
14. Комаров П.В., Жеренкова Л.В. // *Коллоидный журнал.* 2011. Т. 73, № 2. С. 206–214.
15. Сдобняков Н.Ю., Соколов Д.Н., Жеренкова Л.В., Кутилин П.С., Комаров П.В. // *Конденсированные среды и межфазные границы.* 2013. Т. 15, № 2, С.165–172.
16. Wong G.C.L. // *Curr. Opin. Colloid Interface Sci.* 2006. V.11, №6. P.310–315.
17. Wong G.C.L., Pollack L. // *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2010. V. 61. P. 171–189.
18. Komarov P.V., Zherenkova L.V., Khalatur P.G. // *Chem. Phys. Lett.* 2006. V. 420, № 1–3. P. 29–34.
19. Komarov P.V., Zherenkova L.V., Khalatura P.G., Reineker P. // *J. Chem. Phys.* 2006. V. 125, № 15. P. 154906–154911.
20. Schiessel H., Pincus P. // *Macromolecules.* 1998. V. 31, № 22. P. 7953–7959.
21. Dobrynin A.V., Rubinstein M., Obukhov S.P. // *Macromolecules.* 1996. V. 29, № 8. P. 2974–2979.
22. Borue V.Y., Erukhimovich I.Ya. // *Macromolecules.* 1988. V. 21, № 11. P. 3240–3249.

23. Dormidontova E.E., Erukhimovich I.Ya., Khokhlov A.R. // *Macromol. Theory Simul.* 1994. V. 3, № 3. P. 661–675.
24. Shew C.Y., Yethiraj A. // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106, № 13. P. 5706–5720.
25. Shew C.Y., Yethiraj A. // *J. Chem. Phys.* 1999. V.110, №11. P.5437–5444.
26. Shew C.Y., Yethiraj A. // *J. Chem. Phys.* 1999. V.110, №23. P.11599–11608.
27. Dumitrowska M., Belloni L. // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 109, № 11. P.4659–4670.
28. Криксин Ю.А., Халатур П.Г., Хохлов А.Р. // *Математическое моделирование.* 2000. Т. 12, № 10. С. 110–120.
29. Zherenkova L.V., Kriksin Y.A., Talitskikh S.K., Khalatur P.G. // *Polymer Science A.* 2002. V. 44, № 7. P. 791–799.
30. Березкин А.В., Комаров П.В., Талицких С.К., Халатур П.Г. // *Высокомолекулярные соединения. Сер. А.* 2003. Т. 45. № 5. С. 804–813.
31. Thüнеманн А.Ф. // *Prog. Polym. Sci.* 2002. V. 27, № 8. P. 1473–1572.
32. Förster S., Plantenberg T. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2002. V. 41, № 5. P. 689–714
33. Ikkalaa O., Brinke G. // *Chem. Commun.* 2004. № 19. P. 2131–2137.
34. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.N., Teller E. // *J. Chem. Phys.* 1953. V. 21, № 6. P. 1087–1092.
35. Ewald P. // *Annalen der Physik.* 1921. V. 369, № 3. P. 253–287.

### Formation of Supramolecular Agregates of Rigid-Polyanions

P.V. Komarov<sup>1,2</sup>, V.A. Ivanov<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Tver State University

<sup>2</sup>INEOS, RAS, Moscow

<sup>3</sup>Lomonosov Moscow State University

The features of the processes of self-organization in aqueous solutions in the presence of polyanions rod rod short polycations.

**Keywords:** *polyelectrolytes, self-assembly, Monte Carlo*

Об авторах:

КОМАРОВ Павел Вячеславович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики Тверского государственного университета, старший научный сотрудник ИНЭОС РАН, e-mail: pv\_komarov@mail.ru

ИВАНОВ Виктор Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полимеров и кристаллов, МГУ имени М.В. Ломоносова, e-mail: [ivanov@polly.phys.msu.ru](mailto:ivanov@polly.phys.msu.ru)