

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ЛИНЕЙНЫХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ С РАЗВЕТВЛЕННЫМИ МАКРОМОЛЕКУЛАМИ В РАСТВОРЕ

А. А. Даринский, С. В. Люлин, С. В. Ларин

*Институт высокомолекулярных соединений РАН
(ИВС РАН), Москва*

Представлены результаты моделирования интерполимерных комплексов, образованных в растворе линейными полиэлектролитами (ЛПЭ) и противоположно заряженными разветвленными макромолекулами (РМ): полимерными звездами, дендримерами, гребнеобразными полимерами. Использован метод стохастической динамики. Растворимые комплексы возникают, если заряды компонентов не скомпенсированы. Если заряд ЛПЭ выше, чем заряд РМ, наблюдается эффект перезарядки: на РМ адсорбируется больше заряда, чем необходимо для его нейтрализации. В противоположном случае для комплексов с полимерными звездами и гребнеобразными полимерами наблюдается эффект диспропорционирования: часть лучей или боковых цепей входит в комплекс, другая — входит в заряженную корону. Комплексы с гребнеобразным полимером при небольших степенях нейтрализации образуют структуры типа «ожерелье».

Ключевые слова: компьютерное моделирование, интерполиэлектролитные комплексы.

Интерполимерным комплексом называется молекулярный объект, образованный в результате взаимодействия двух или более полимерных макромолекул. Такие комплексы представляют большой интерес как с чисто научной точки зрения, так и с точки зрения практических приложений. Движущими силами образования комплексов могут быть либо короткодействующие взаимодействия, такие как гидрофобные взаимодействия или образование водородных связей, либо дальнедействующие взаимодействия, такие как электростатические. В этом случае образующие комплекс макромолекулы должны быть ионизованы и нести заряды противоположного знака. Комплексы, образованные заряженными макромолекулами, представляют особый интерес для приложений в биологии и медицине в силу растворимости в воде их компонентов. Их называют интерполиэлектролитными комплексами (ИПЭК). Особую группу составляют комплексы, образованные разветвленным макроионом, несущим ионогенные группы, и линейным полиэлектролитом противоположного знака. В качестве разветвленных макроионов могут использоваться

Даринский Анатолий Анатольевич — заведующий лабораторией, д-р физ.-мат. наук, e-mail: a.darinskii@mail.ru.

Люлин Сергей Владимирович — старший научный сотрудник, канд. физ.-мат. наук, e-mail: serge@macro.ru.

Ларин Сергей Владимирович — аспирант, e-mail: selarin@macro.ru.

- Nguyen T. T., Shklovskii B. I. (2001) Overcharging of a Macroion by an Oppositely Charged Polyelectrolyte // *Physica A*. 2001. V. 293. N. 3–4. P. 324–338.
- Pergushov D. V., Remizova E. V., Gradzielski M., Lindner P., Feldthusen J., Zezin A. B., Müller A. H. E., Kabanov V. A. (2004) Micelles of polyisobutylene-*block*-poly(methacrylic acid) Diblock Copolymers and their Water-Soluble Interpolyelectrolyte Complexes Formed with Quaternized poly(4-vinylpyridine) // *Polymer*. 2004. V. 45. N. 2. P. 367–378.
- Pergushov D. V., Babin I. A., Plamper F. A., Zezin A. B., Müller A. H. E. (2008) Water-Soluble Complexes of Star-Shaped Poly(acrylic acid) with Quaternized Poly(4-vinylpyridine) // *Langmuir*. 2008. V. 24. N. 13. P. 6414–6419.

COMPUTER SIMULATION OF COMPLEXES OF LINEAR POLYELECTROLYTES WITH BRANCHED MACROMOLECULES IN SOLUTION

A. A. Darinskii, S. V. Lyulin, S. V. Larin

*Institute of Macromolecular Compounds, Russian Academy of Sciences
(IMC RAS), Moscow*

Results of the computer simulation of interpolymer complexes (IPC) formed by linear polyelectrolytes (LPE) and oppositely charged branched macroions (BMI) (dendrimers, polymer stars, and bottle-brushes) are presented. The stochastic dynamics method was used. Soluble IPC arise when the charges of components are not compensating each other. If the charge of LPE is higher than that of BMI the overcharging effect is observed, i.e. the amount of the adsorbed charge on a BMI is larger than it is necessary for the BMI neutralization. In the opposite case for complexes of LPE with stars and bottle-brushes the effect of the disproportionation is observed. The fraction of star arms (side chains for a bottle-brush) is collapsed into the complex; other chains form a charged corona. IPO's with bottle-brushes form necklace-like structures at small degrees of the neutralization.

Keywords: computer simulation, interpolyelectrolytic complexes.

Darinskii Anatoly Anatoljevich — Head of the laboratory, Doctor of physics, e-mail: a.darinskii@mail.ru.

Lyulin Sergey Vladimirovich — Senior researcher, Ph. D., e-mail: serge@macro.ru

Larin Sergey Vladimirovich — Postgraduate student, e-mail: selarin@macro.ru.