

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОСБОРКИ НАНОПРОВОДА НА МАТРИЦЕ ДНК

© 2013 Н. Ю. Сдобняков<sup>1</sup>, Д. Н. Соколов<sup>1</sup>, Л. В. Жеренкова<sup>1</sup>, П. С. Кутилин<sup>1</sup>, П. В. Комаров<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Тверской государственный университет, Садовый пер., 35, 170002 Тверь, Россия

<sup>2</sup>Учреждение Российской академии наук Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова  
РАН, ул. Вавилова, 28, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 17.01.2013 г.

**Аннотация.** Методом Монте-Карло исследуются условия самосборки нанопровода на матрице ДНК в водном растворе. Металлическое покрытие формируется в результате электростатического взаимодействия отрицательно заряженных групп полианиона и положительно заряженных функционализированных наночастиц золота.

**Ключевые слова:** потенциал Гупта, метод Монте-Карло, самосборка нанопровода, ДНК.

### ВВЕДЕНИЕ

Главным препятствием дальнейшего повышения степени интеграции микросхем являются так называемые размерные эффекты. В настоящее время активно развиваются концепции построения элементной базы из блоков нанометрового масштаба. В зависимости от используемых компонентов эти направления получили соответственно названия «нано» и «молекулярной электроники» [1—3]. В основе последней лежат методы, основанные на явлениях самоорганизации органических молекул за счет вторичных взаимодействий (водородных связей,  $\pi$ - $\pi$  стекинга, ионных взаимодействий, гидрофильных/гидрофобных взаимодействий и др.) между их специфическими функциональными группами и неорганическими наночастицами с модифицированной и немодифицированной поверхностью [4—6].

Биологические макромолекулы являются хорошей конструктивной основой для построения наноразмерных комплектов [7]. Большой практический интерес, в частности, вызывает молекула дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) в силу таких важных свойств как механическая жесткость, высокая стабильность, программируемость, дешевизна получения и удобство в манипулировании [8, 9]. В частности, компанией IBM уже разработана технология, предполагающая объединение традиционной литографии и метода самосборки структур на основе дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) [10]. В данном случае ДНК играет роль

своеобразных «строительных лесов», обеспечивающих возможность точного позиционирования микроскопических элементов чипа — углеродных нанотрубок, нанопроводников и наночастиц. Способность структур ДНК к самоорганизации является ключевым фактором, необходимым для получения миниатюрных микросхем с высокой плотностью компоновки элементов. Как ожидается, новая технология позволит повысить быстродействие чипов, одновременно снизив их энергопотребление и затраты на производство.

В данной публикации мы рассматриваем возможность реализации управляемой самосборки проводящего металлического покрытия на матрице ДНК. Идея метода состоит в использовании электростатического взаимодействия между противоположно заряженными фосфатными группами ДНК и функционализированными наночастицами золота (НЧ) [11—13]. В перечисленных публикациях авторы реализуют металлизацию за два последовательных этапа — внедрения наночастиц в ДНК и последующей металлизации. Главная цель данного исследования состоит в поиске оптимальных условий, при которых формирование металлического покрытия возможно осуществить в ходе одного этапа. При этом электростатическое взаимодействие позволяет реализовать контролируемую доставку наночастиц к поверхности полианиона. Стабильность формирующемуся ультратонкому слою из НЧ придает металлическое взаимодействие между соседними частицами.

### МОДЕЛЬ И МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ МК МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сформулируем компьютерную модель изучения процесса получения металлического покрытия на матрице диссоциированной дезоксирибонуклеиновой кислоты. Поскольку ДНК является жесткоцепной макромолекулой (персистентная длина  $\sim 150$  пар оснований), она была построена в виде линейной цепи с элементами двуспиральной структуры. Отрицательно заряженные силовые центры диаметра  $0,3\sigma$  располагаются на расстоянии  $2\sigma$  ( $\sigma$  – единица длины равная  $10 \text{ \AA}$ ) на отрезках, перпендикулярных оси макромолекулы. Расстояние между отрезками вдоль главной оси равно  $0,34\sigma$ . При переходе от одной пары зарядов (моделирующих основания) к соседней, отрезок поворачивается на угол  $2\pi/10$ . Предполагается, что молекула полностью диссоциирована. Расстояние между парой зарядов заполнено перекрывающимися сферами диаметра  $0,4\sigma$  с шагом  $0,2\sigma$ . Такое построение позволяет, в первом приближении, моделировать особенности двуспиральной структуры ДНК (см. рис. 1). Полное число пар оснований было выбрано равным 100, что составляет  $34\sigma$ . Предполагается, что все наночастицы являются функционализированными, т. е. они несут на своей поверхности некоторую положительную заряженную НЧ рассматривались как бесструктурные сферические частицы со средним диаметром  $D$ , поскольку их внутренняя энергия при изучаемых условиях практически не изменяется [14, 15, 16]. НЧ генерировались так, чтобы разброс их диаметров подчинялся нормальному распределению с дисперсией  $d$ . Для моделирования функциональных групп, к поверхности НЧ дополнительно

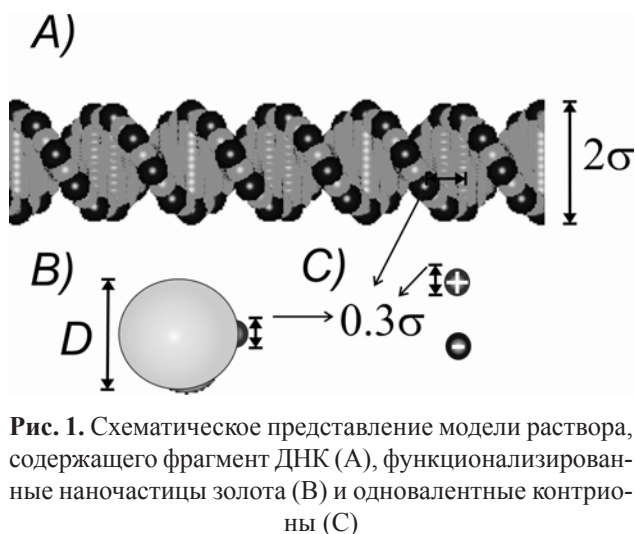


Рис. 1. Схематическое представление модели раствора, содержащего фрагмент ДНК (А), функционализированные наночастицы золота (В) и одновалентные контрионы (С)

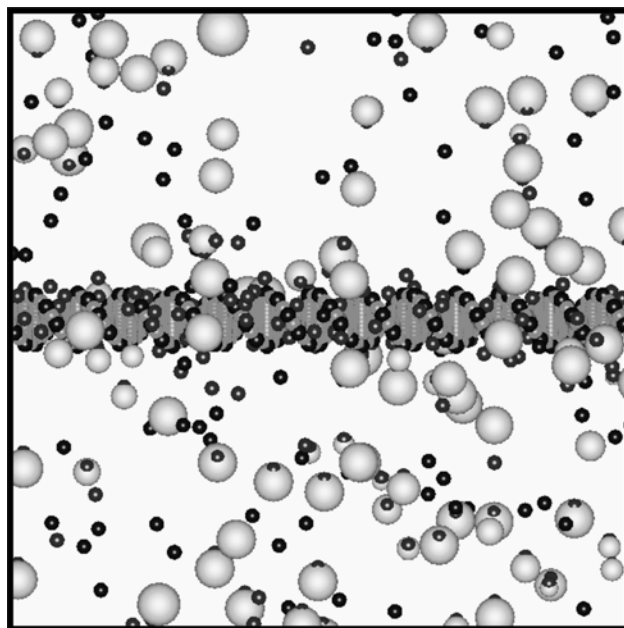


Рис. 2. Мгновенный снимок ячейки моделирования в начальном состоянии, отношение размеров и раскраска компонентов модели соответствует рис. 1.

были присоединены сферические силовые центры с зарядом  $q$  и диаметром  $0,3\sigma$ .

Одновалентные ионы, образующиеся при диссоциации ДНК и функциональных групп наночастиц, моделируются сферами диаметра  $0,3\sigma$ . Число положительных контрионов равно числу единичных зарядов на матрице ДНК. Количество отрицательных контрионов соответствует суммарному числу элементарных зарядов всех наночастиц. Таким образом, в системе соблюдается условие электронейтральности. Растворитель рассматривается как непрерывная среда с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = 80$ . Пример начального состояния ячейки моделирования показан на рис. 2.

На основе атомистического многочастичного потенциала Гупта [17, 18] нами получено простое приближение для описания взаимодействия между наночастицами. Для этого было выполнено рассмотрение наночастиц, состоящих из  $A$  атомов золота. Значение потенциальной энергии  $i$ -го атома НЧ как функция межатомного расстояния  $r_{ij}$  определяется посредством потенциала Гупта следующим образом:

$$U_i = \sum_{j=1, i \neq j}^A \vartheta \exp\left(-C_1 \left(\frac{r_{ij}}{D_{Au}} - 1\right)\right) - \sqrt{\sum_{j=1, i \neq j}^A \zeta^2 \exp\left(-2C_2 \left(\frac{r_{ij}}{D_{Au}} - 1\right)\right)} \quad (1)$$

Для золота параметры потенциала имеют следующие значения:  $\vartheta = 0,2061 eV$ ,  $C_1 = 10,229$ ,  $\zeta = 1,79 eV$ ,  $C_2 = 4,036$ ,  $D_{Au} = 2,88 \text{ \AA}$  [19]. Известно, что потенциал Гупта является короткодействующим. Легко убедиться, что для различных конфигураций атомов золота потенциальная энергия одного атома в зависимости от радиуса обрезки потенциала  $R$  выходит на насыщение уже при  $R \approx 6 \text{ \AA}$  [20]. Это означает, что существенное влияние на отдельный атом металла оказывают соседи из его ближайшего окружения. Следовательно, при сближении двух НЧ их взаимодействие будет определяться не всеми атомами, а только теми, которые расположены в зоне контакта. К зоне контакта принадлежат атомы, расположенные на поверхностях НЧ, и расстояние между которыми не превышает радиуса насыщения металлического потенциала. Тогда потенциальная энергия взаимодействия двух наночастиц золота в первом приближении может быть представлена в виде простой формулы, куда входит среднее число атомов  $N$  в зоне контакта и расстояние между поверхностями НЧ  $\Delta r_{\alpha\beta}$ :

$$U_{\alpha\beta}^{NN}(\Delta r_{\alpha\beta}) = N(N-1)\vartheta \exp\left(-C_1 \frac{\Delta r_{\alpha\beta}}{D_{Au}}\right) - N \sqrt{(N-1)\zeta^2 \exp\left(-C_2 \frac{\Delta r_{\alpha\beta}}{D_{Au}}\right)}. \quad (2)$$

Число  $N$  устанавливается из отношения площадей, приходящихся на зону соприкосновения наночастиц;  $\Delta r_{\alpha\beta}$  определяется как расстояние между поверхностями наночастиц  $\alpha$  и  $\beta$  вдоль оси, соединяющей их центры. Достаточно высокую точность формулы (2) подтверждают численные расчеты энергии взаимодействия двух наночастиц на основе их атомистической модели с использованием потенциала (1) [20]. Таким образом, нами получена простая аппроксимация потенциала, описывающего взаимодействие наночастиц золота без учета их атомистической структуры.

Использование парного потенциала (2) позволяет существенно экономить время в задачах численного моделирования коллоидных дисперсий НЧ переходных металлов. При этом полная потенциальная энергия моделируемой системы определяется в виде следующей суммы:

$$U = \sum_{\alpha=1, \alpha < \beta}^{N_{total}} (U_{\alpha\beta}^{excl} + U_{\alpha\beta}^Q + U_{\alpha\beta}^{NN}), \quad (3)$$

где  $N_{total}$  — общее число силовых центров в системе. Выражения для первых двух потенциалов, исключенного объема и кулоновского, имеют вид:

$$U_{\alpha\beta}^{excl} = \begin{cases} 4\epsilon_{LJ} \left( \left( \frac{\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta}}{2r_{\alpha\beta}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta}}{2r_{\alpha\beta}} \right)^6 + \frac{1}{4} \right), & r_{\alpha\beta} \leq r_0; \\ 0, & r_{\alpha\beta} > r_0; \end{cases} \quad (4)$$

$$r_0 = 2^{1/6} \frac{\sigma_{\alpha} + \sigma_{\beta}}{2},$$

$$U_{\alpha\beta}^Q = \frac{q_{\alpha}q_{\beta}}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{\alpha\beta}}. \quad (5)$$

Здесь соответственно  $\sigma_{\alpha}$ ,  $\sigma_{\beta}$  — диаметры силовых центров,  $\epsilon_{LJ}$  — силовая константа,  $\epsilon_0$  — диэлектрическая проницаемость вакуума,  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость среды. В расчетах использовалось  $\epsilon_{LJ} = 0,1$  (в единицах  $k_B$  — постоянная Больцмана и  $T$  — абсолютная температура) и  $\epsilon = 80$ .

Потенциал взаимодействия двух НЧ  $U_{\alpha\beta}^{NN}$  описывается формулой (2).

Эволюция системы была разыграна методом Монте-Карло. Начальное распределение НЧ и контрионов генерировались случайным образом в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Размер ребра ячейки равен длине фрагмента ДНК, т. е.  $34\sigma$ . Последовательность микросостояний системы, отвечающих заданному каноническому ансамблю, генерировалась методом существенной выборки [21]. Каждая новая конфигурация строилась на основе предыдущей путем перемещения и вращения случайно выбранной наночастицы или смещения одновалентного контриона (с равной вероятностью). Величина смещения силовых центров (наночастиц и ионов) не превышала величины  $0,288\sigma$ . Это значение так же использовалось для задания ограничения на тангенциальное смещение силовых центров на поверхности НЧ, ограничивающих максимальный угол поворота. Силовые центры, образующие полианион, являлись неподвижными. Вероятность возникновения новой конфигурации оценивается нами на основе хорошо известного соотношения  $P(\Delta U) = \min\{1, \exp(-\Delta U/kT)\}$ , где  $\Delta U$  есть раз-

ность полной энергии системы в старом и новом состоянии,  $T = 298 K$ .

Для устранения влияния особенностей начального состояния системы на результат эволюции системы мы для каждого набора параметров мы выполнили по 3 независимых просчета с последующим усреднением результатов. Усреднение результатов проводилось на равновесном участке траектории, когда значения изучаемых характеристик достигали насыщающего плато. Максимальное число МК-шагов составляло  $4 \times 10^6$ . Непосредственно нас интересовала структура образующегося металлического покрытия на молекуле матрицы в зависимости от величины заряда на поверхности НЧ и диаметра НЧ. Предполагается, что образующееся покрытие обладает проводимостью, если центры наночастиц, находящихся в контакте, можно объединить непрерывной сетью связей вдоль всей длины агрегата в ячейки моделирования.

Завершение процесса самосборки нанопровода контролировалось посредством расчета агрегационного числа  $N_{agg}$ . При его вычислении суммируются НЧ, как непосредственно, так и опосредованно через соседей, контактирующие с поверхностью матрицы. Самосборка считалась завершенной, если в течение 100 000 МК шагов значение  $N_{agg}$  не изменялось.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 представлена зависимость  $N_{agg}$  от диаметра наночастиц. Полученные значения  $N_{agg}$  свидетельствуют о формировании металлического покрытия матрицы во всей области параметров. Еще раз отметим роль кулоновского и металлического потенциалов в процессе металлизации ДНК. Дальнедействующий кулоновский потенциал обеспечивает механизм доставки НЧ к поверхности полианиона, наличие же короткодействующего сильного металлического потенциала «склеивает» наночастицы, в результате этого на фрагменте ДНК постепенно формируется металлический слой.

Поведение  $N_{agg}(D)$  имеет немонотонный характер. Особенно выделяется случай для  $q = 3$ , когда  $N_{agg}(D)$  имеет минимум при  $D = 1,75\sigma$ . Объясняется это тем, что заряды матрицы являются центрами притяжения как для наночастиц, так и для положительно заряженных контрионов. При этом оптимальная упаковка наночастиц, непосредственно контактирующих с поверхностью матрицы, определяется наличием двух факторов — сте-

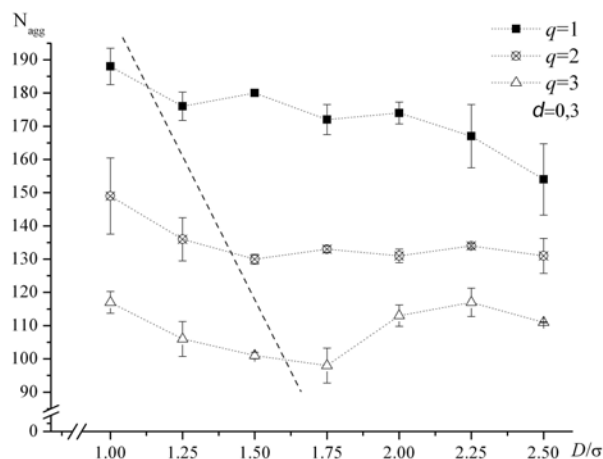


Рис. 3. Зависимость агрегационного числа  $N_{agg}$  от диаметра наночастиц при различных значениях заряда  $q$ . Пунктирная линия показывает область параметров (точки с права от прямой), при которых в системе возникает непрерывный металлический слой

рического и электростатического, которые определенным образом влияют на агрегационный процесс. Стерический фактор отражает наличие характерных расстояний между отрицательными зарядами молекулы ДНК, имеющей двуспиральную структуру, а также конечностью размеров поверхности молекулы-матрицы. Очевидно, что агрегационные характеристики должны зависеть от соотношения размеров наночастиц, контрионов и характерных расстояний матрицы. Электростати-

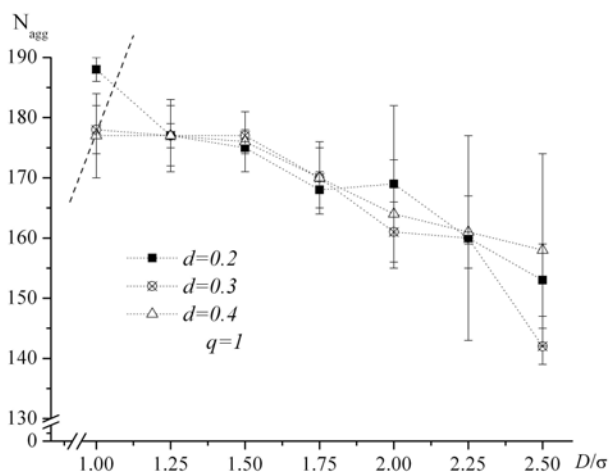
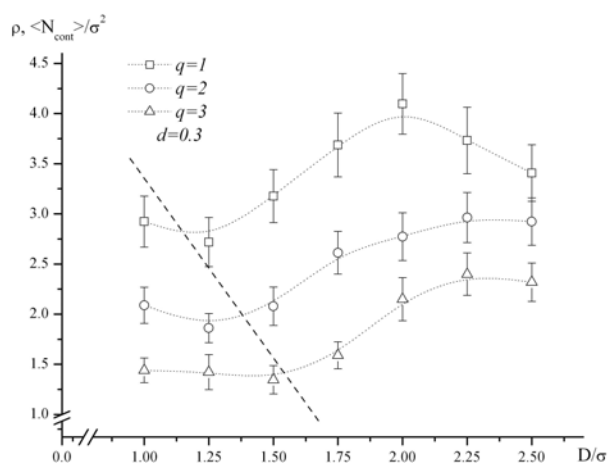
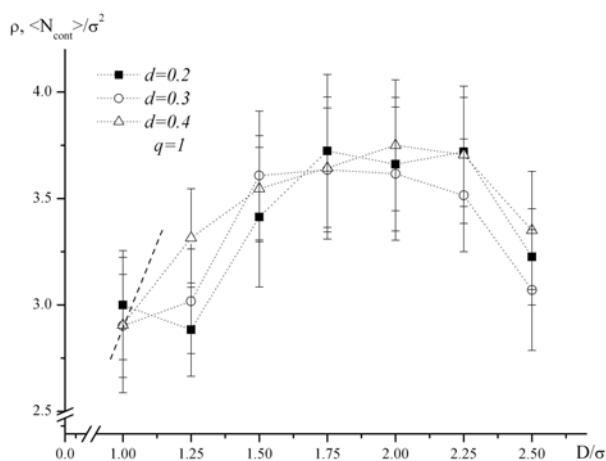


Рис. 4. Зависимость агрегационного числа  $N_{agg}$  от диаметра наночастиц при различных значениях дисперсии  $d$ . Пунктирная линия показывает область параметров (точки с права от прямой), при которых в системе возникает непрерывный металлический слой



**Рис. 5.** Средняя поверхностная плотность  $\rho$  контактов наночастицы агрегата с соседними наночастицами как функция диаметра НЧ при различных значениях электрического заряда  $q$ . Для значений  $\rho$ , лежащих правее пунктирной линии, в металлическом слое можно выделить хотя бы одну цепь непрерывно контактирующих пар наночастиц

ческий фактор включает в себя влияние величин зарядов наночастиц. Из рис. 3 видно, что при увеличении заряда  $q$  происходит постепенное падение числа НЧ, агрегирующих на поверхности полианиона, что может приводить к нарушению целостности проводящего слоя. При каждом значении параметра  $q$  (см. рис. 3), существует свое



**Рис. 6.** Средняя поверхностная плотность  $\rho$  контактов наночастицы агрегата с соседними наночастицами как функция диаметра НЧ при различных значениях дисперсии  $d$ . Для значений  $\rho$ , лежащих правее пунктирной линии, в металлическом слое, можно выделить хотя бы одну цепь непрерывно контактирующих пар наночастиц

значение  $D^*$ , начиная с которого  $D > D^*$ , металлический слой становится непрерывным. При этом, чем меньше заряд на поверхности НЧ, тем меньшего диаметра могут быть НЧ, необходимые для формирования непрерывного слоя. Уменьшение  $N_{agg}$  с ростом  $D$  связано с уменьшением вероятности агрегации наночастицы в слой, непосредственно не контактирующей с поверхностью матрицы.

Заметим, что значение  $N_{agg}$  определяется достижением компенсации поверхностного заряда матрицы. При этом кроме агрегации НЧ, вблизи поверхности ДНК концентрируются и положительные противоионы, также компенсирующие заряд полианиона. Поскольку отрицательный заряд расположен на молекуле ДНК, а положительный заряд смещен к поверхности агрегата, поэтому даже в том случае, когда суммарный заряд агрегата остается отрицательным, его взаимодействие со свободными НЧ может быть отталкивающим.

Рост агрегационного числа с увеличением диаметра наночастиц на интервале  $D \in [1, 75\sigma; 2, 25\sigma]$  для  $q = 3$  обусловлен оптимизацией упаковки наночастиц в первом и втором слое агрегата. Это связано как с уменьшением отталкивания между наночастицами (с ростом  $D$ ), так и с изменением соотношений характерных расстояний матрицы и размера наночастиц. Более плотная упаковка наночастиц в первом слое металлического агрегата сопровождается практически полным вытеснением контрионов с поверхности фрагмента ДНК.

На рис. 4 показана зависимость агрегационного числа  $N_{agg}$  от диаметра наночастиц и его полидисперсности в случае  $q = 1$ . Полученные результаты свидетельствуют, что небольшой разброс диаметров слабо отражается на общем ходе зависимости  $N_{agg}(D)$ , хотя надо отметить, что увеличение разброса диаметров для случая, когда НЧ имеют средний диаметр  $\langle D \rangle = 1$ , позволяет получить непрерывное металлическое покрытие. Поскольку, агрегационное число не может характеризовать качество металлического покрытия с точки зрения проводимости, сравнительную качественную оценку проводимости можно получить на основе расчета средней плотности числа прямых контактов  $N_{cont} / \sigma^2$  наночастиц с их ближайшими соседями.

На рис. 5 нами приводится зависимость  $\rho = \langle N_{cont} \rangle / \sigma^2$  от диаметра наночастиц и заряда на их поверхности. Вертикальная линия указывает границу, справа от которой формируется непре-

рывный металлический слой. Здесь необходимо еще раз пояснить, что под непрерывным слоем мы понимаем такое распределение НЧ по поверхности полианиона, при котором существует хотя бы одна непрерывная цепь контактирующих НЧ, вдоль которой возможна свободная миграция электронов. Как видно из этого рисунка, при увеличении электрического заряда имеет место тенденция к уменьшению средней поверхностной плотности контактов, однако характер зависимости в целом сохраняется.

На рис. 6 представлена зависимость среднего числа прямых плотности контактов  $\rho$  НЧ при наличии полидисперсности в распределении диаме-

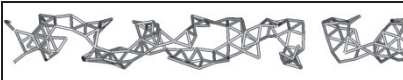
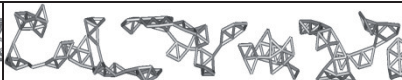
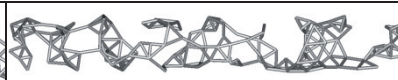





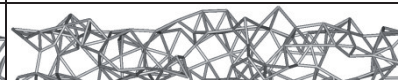
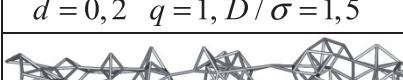
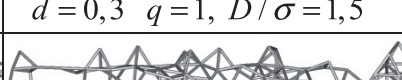
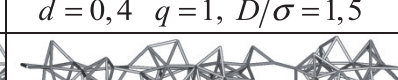
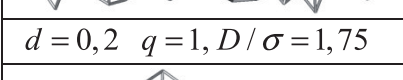
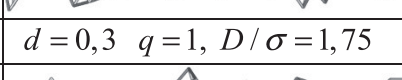
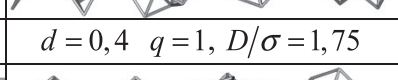


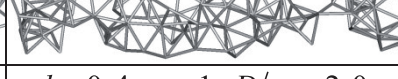


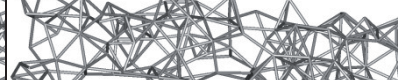
тров НЧ. При использовании электростатического метода квази-непрерывное металлическое покрытие формируется при всех  $D > \sigma$  рассматриваемого диапазона. Полученные результаты свидетельствуют о том, что при изменении дисперсии вид зависимостей средней поверхностной плотности контактов наночастицы агрегата с соседними наночастицами изменяется слабо и лишь при значенных диаметра и наблюдается существенный разброс значений.

Кроме того, в табл. 1 и 2 представлена визуализация контактов между наночастицами, образующихся при изменении параметров моделирования.

**Таблица 1.** Схематическое изображение контактов между наночастицами получаемых при изменении заряда функциональной группы НЧ [22]

$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 1,0$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 1,0$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 1,0$
$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 1,25$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 1,25$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 1,25$
$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 1,5$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 1,5$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 1,5$
$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 1,75$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 1,75$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 1,75$
$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 2,0$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 2,0$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 2,0$
$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 2,25$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 2,25$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 2,25$
$d = 0,3 \quad q = 1, \quad D/\sigma = 2,5$	$d = 0,3 \quad q = 2, \quad D/\sigma = 2,5$	$d = 0,3 \quad q = 3, \quad D/\sigma = 2,5$

**Таблица 2.** Схематическое изображение контактов между наночастицами, получаемых при изменении дисперсности системы [22]

		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 1,0$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 1,0$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 1,0$
		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 1,25$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 1,25$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 1,25$
		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 1,5$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 1,5$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 1,5$
		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 1,75$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 1,75$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 1,75$
		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 2,0$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 2,0$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 2,0$
		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 2,25$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 2,25$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 2,25$
		
$d = 0,2 \quad q = 1, D/\sigma = 2,5$	$d = 0,3 \quad q = 1, D/\sigma = 2,5$	$d = 0,4 \quad q = 1, D/\sigma = 2,5$

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе исследована возможность реализации самосборки нанопровода матрице ДНК посредством использования электростатического взаимодействия между полианионом и функционализированными НЧ золота в условиях водного раствора. В качестве главных параметров были использованы средний диаметр наночастиц  $D$ , дисперсия диаметра  $d$  и заряд  $q$  на поверхности НЧ. Показана принципиальная возможность получения непрерывных металлических покрытий в ходе одного этапа при определенных значениях параметров модели. Полученные результаты могут служить ориентиром при выборе оптимальных

условий для реализации процесса самосборки в ходе экспериментальных исследований.

*Работа выполнена в рамках проекта РФФИ № 12-03-31593\_мол\_а.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wei L., Lieber C. M. // Nat. Mater. 2007. V. 6. P. 841.
2. Iniewski K. Nanoelectronics: Nanowires, Molecular Electronics and Nanodevices. McGraw-Hill, 2011. P. 559.
3. George R. W., Martin D. H., Schubert and U. S., et al. // Nat. Mater. 2011. V.10. P. 176.
4. Shaw C. P., Fernig D. G., Levy R. // J. Mat. Chem. 2011 V. 21. P. 12181.
5. Glotzer S. C., Solomon M. J., Kotov N. A. // AIChE Journal 2004. V. 50. P. 2978.
6. Steed J. W., Turner D. R., Wallace K. J. Core con-

- cept in supramolecular chemistry and nanotechnology. John Wiley & Sons. Ltd, 2007. P. 320
7. Niemeyer C. M. // *Angew. Chem. Int. Ed.* 2001. V. 40. P. 4128.
  8. Bittner, A. M. // *Naturwissenschaften.* 2005. V. 92. P. 51.
  9. Vincent M. R. // *Nat. Mater.* 2009. V. 8. P. 539.
  10. Kershner R. J., Bozano L. D., Micheel C. M., et al. // *Nat. Nanotechnology.* 2009. V. 4. P. 557.
  11. Daniel M. C., Astruc D. // *Chem. Rev.* 2004. V. 104. P. 293.
  12. Prasad B. L. V., Sorensen C. M., Klabunde K. J. // *Chem. Soc. Rev.* 2008. V. 37. P. 1871.
  13. Coomber D., Bartczak D., Gerrard S. R., et al. // *Langmuir.* 2010. V. 26. № 17. P. 13760.
  14. Komarov P. V., Zherenkova L. V., Khalatur P. G. // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128. P. 124909.
  15. Berezkin A. V., Komarov P. V., Talitskikh S. K., et al. // *J. Polym. Sci.* 2003. A 45. P. 485.
  16. Komarov P. V., Zherenkova L. V., Khalatur P. G., et al. // *J. Chem. Phys.* 2006. V. 125. P. 154906.
  17. Gupta R. P. // *Phys. Rev. B.* 1981. V. 23. P. 6265.
  18. Wilson N. T., Johnson R. L. // *J. Mat. Chem.* 2002. V. 12. P. 2913.
  19. Cleri F., Rosato V. // *Phys. Rev. B: Condens. Matter.* 1993. V. 48. P. 22.
  20. Комаров П. В., Жеренкова Л. В., Халатур П. Г. и др. // *Российские нанотехнологии.* 2007. Т. 2. Вып. 7—8. С. 92.
  21. Metropolis N., et al. // *J. of Mat. Chem.* 1953. V. 21. P. 1087.
  22. Комаров П. В., Кутилин П. С., Жеренкова Л. В. и др. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В. М. Самсонова, Н. Ю. Сдобнякова. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2011. Вып. 3. С. 96.*

---

*Сдобняков Николай Юрьевич* — доцент кафедры теоретической физики, Тверской государственный университет; тел.: (4822) 585343 (доб. 106), e-mail: nsdobnyakov@mail.ru

*Соколов Денис Николаевич* — аспирант кафедры теоретической физики Тверской государственный университет; тел.: (4822) 585343 (доб. 106), e-mail: dnsokolov@mail.ru

*Кутилин Павел Сергеевич* — студент магистратуры кафедры теоретической физики, Тверской государственный университет; тел.: (4822) 585343 (доб. 106), e-mail: achan9108@mail.ru

*Жеренкова Любовь Витальевна* — доцент кафедры общей физики, Тверской государственный университет; тел.: (4822) 581493 (доб. 133), e-mail: zherenkova@mail.ru

*Комаров Павел Вячеславович* — доцент кафедры теоретической физики, Тверской государственный университет; тел.: (4822) 585343 (доб. 106), e-mail: pv\_komarov@mail.ru

*Sdobnyakov Nikolay Y.* — Associate Professor of Department of the Theoretical Physics, Tver State University; tel.: (4822) 585343 (addl. 106), e-mail: nsdobnyakov@mail.ru

*Sokolov Denis N.* — postgraduate student of Department of the Theoretical Physics, Tver State University; tel.: (4822) 585343 (addl. 106), e-mail: dnsokolov@mail.ru

*Kutilin Pavel S.* — graduate student of of Department of the Theoretical Physics, Tver State University; tel.: (4822) 585343 (addl. 106), e-mail: achan9108@mail.ru

*Zherenkova Lyubov V.* — Associate Professor of Department of the Theoretical Physics, Tver State University; tel.: (4822) 581493 (addl. 133), e-mail: zherenkova@mail.ru

*Komarov Pavel V.* — Associate Professor of Department of the Theoretical Physics, Tver State University; tel.: (4822) 585343 (addl. 106), e-mail: pv\_komarov@mail.ru