

Д. В. Журкин, А. Л. Рабинович (Петрозаводск, ПетрГУ, ИБ КарНЦ РАН). **Алгоритм представления цепной молекулы и имитации методом Монте-Карло.**

Предложен общий подход для описания структуры цепной молекулы, имитация конформационного поведения которой в последующем осуществляется методом Монте-Карло (МК). Все параметры молекулы, которые описывают ее строение (типы атомов, равновесные длины валентных связей, валентных углов, парциальные заряды на атомах), задаются в виде совокупностей матриц. Для однозначного задания информации о каждом атоме последнему присваивается свой код или номер. В предлагаемом методе признаком, по которому данному атому присваивается определенный числовой код (и все атомы с этим кодом образуют одну группу), является количество связей (или атомов), которые располагаются между начальным атомом и данным атомом. Благодаря матричному представлению подпрограммы, используемые для обработки параметров произвольных конфигураций атомов молекулы, являются более компактными. Точность результатов, получаемых с помощью метода МК, определяется сходимостью средних значений искомых величин к математическому ожиданию соответствующей случайной величины. Для правильной оценки методом МК многомерного интеграла, имеющего N переменных интегрирования, необходимо использовать такой генератор псевдослучайных чисел (ГПСЧ), который бы давал возможно более равномерное распределение ПСЧ генерируемой последовательности в пространстве размерностью N . В настоящей работе рассмотрено пять наиболее известных ГПСЧ, проанализировано восемь наиболее распространенных тестов для ГПСЧ.

Разработанная программа компьютерной имитации была использована для исследования свойств нескольких тестовых углеводородных цепных молекул, содержащих и не содержащих двойные связи в основной цепи. Были рассчитаны также поверхности потенциальной энергии небольших фрагментов молекул, содержащих пары взаимозависимых углов внутреннего вращения, а также совокупности эквиэнергетических линий (конформационные карты) этих молекулярных фрагментов. В итоге показано, что с увеличением количества двойных связей цис в молекулярном фрагменте области минимумов потенциальной энергии становятся менее симметричными, отвечают более широким диапазонам изменения углов внутреннего вращения. Показано, что разработанный алгоритм представления молекулы и имитации ее конформационного поведения является достаточно общим, позволяет исследовать свойства молекул широкого класса. Рассчитанные средние характеристики нескольких цепей показали, в частности, что из двух линейных углеводородных цепных молекул, одна из которых содержит двойную связь цис, более жесткой является насыщенная цепь. Наличие двойной связи придает ненасыщенной цепи большую степень подвижности и способности к изгибу.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 10-03-00201a, гранта Президента РФ для ведущих научных школ НШ-3731.2010.4 и Visby programme 00961/2008.