

А. Л. Рабинович, Д. В. Журкин (Петрозаводск, ИБ КарНЦ РАН, ПетрГУ). **Использование метода Монте–Карло для изучения формы цепных молекул.**

При описании различных явлений в физике конденсированного состояния, — таких как вязкий поток молекул, адсорбция молекул на поверхностях или абсорбция и диффузия в пористых системах, важно учитывать форму этих молекул. Информация о подобных свойствах важна и для углеводородных цепных молекул, — как для развития приложений в технологических областях, так и для углубления понимания свойств биологических систем, в состав которых они входят.

В настоящей работе методом Монте–Карло [1] при температурах $T = 293, 303$ и 313 K изучены свойства 65 цепных углеводородных молекул с *cis*-двойными связями, следующего строения: $\text{CH}_3 - (\text{CH}_2)_a - (\text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_2)_d - (\text{CH}_2)_b - \text{CH}_3$, где $a + 3d + b + 2 = 16, 18, 20, 22$; $d = 0, 1, \dots, 6$. Прототипами этих молекул являются остатки жирнокислотных цепей молекул фосфолипидов. Моделирование всех молекул проводили единообразно, в невозмущенном состоянии. Генерирование значений торсионных углов осуществляли в диапазоне $0\text{--}360$ град, использовали метод существенной выборки по энергии ближних взаимодействий, с учетом взаимозависимости каждых трех углов.

Оценку формы каждой молекулы осуществляли аппроксимацией прямоугольным параллелепипедом. Для этого в системе координат $O'XYZ$, выбранной в качестве исходной для каждой конформации данной молекулы, вычисляли координаты центра масс O и параллельным переносом системы $O'XYZ$ совмещали начало координат O с точкой O . Вычисляли компоненты тензора инерции данной конформации и проводили его диагонализацию, определяя в итоге собственные векторы — направления главных осей инерции. Надлежащим поворотом осей координат в точке O совмещали их с главными осями инерции, переходя в итоге в систему координат $Oxyz$. Оси Ox , Oy , Oz в каждой конформации обозначали по единому правилу: ось Ox отвечала наибольшему собственному значению — главному моменту инерции (т. е. соответствовала минимальной протяженности конформации), а ось Oz — наименьшему главному моменту инерции (т. е. максимальной протяженности конформации).

В каждой конформации молекулы вычисляли разности между максимальными и минимальными проекциями всех атомов, отдельно по осям Ox , Oy и Oz . Полученные разности обозначали через g_x , g_y , g_z , соответственно. Это минимальные размеры ребер прямоугольного параллелепипеда (ориентированного параллельно главным осям инерции), в который молекула, определяемая центрами всех атомов, может поместиться целиком в данной конформации. В итоге компьютерного моделирования вычисляли средние величины размеров $\langle g_x \rangle$, $\langle g_y \rangle$, $\langle g_z \rangle$ и их отношений.

Показано, что влияние, которое оказывает на эти размеры углеводородной олигомерной цепи каждый из трех параметров, определяющих ее микроструктуру (количество атомов углерода, количество двойных связей, их местоположение в данной

цепи), является конкурентным. При некоторых сочетаниях параметров возможен компенсационный эффект. Анализ результатов позволил установить, что среди всех изученных молекул существуют совокупности, молекулы в которых, будучи различными по химическому строению, обладают, при использованной аппроксимации, близкими значениями «продольных» размеров $\langle g_z \rangle$. Совокупности молекул, отвечающие разным диапазонам размеров $\langle g_z \rangle$, различаются между собой; их составы коррелируют с жирнокислотными составами фосфолипидов мембран разных биологических объектов.

Работа выполнена при поддержке программы Президента РФ — Ведущие научные школы (НШ-1410.2014.4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рабинович А. Л., Журкин Д. В. Труды Карельского научного центра РАН. Серия Математическое моделирование и информационные технологии, 2013, в. 4, с. 96–111.