

**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  $313\text{ K}$  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 каждого 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.