

# МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ СЕГМЕНТОВ ПОЛИМЕРНОГО КЛУБКА МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО<sup>1</sup>

**А.С. Вишневский, А.Е. Чалых, В.К. Герасимов**

*Лаборатория структурно-морфологических исследований ИФХЭ РАН,  
119071, Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4;  
e-mail: [trust-no-one@mail.ru](mailto:trust-no-one@mail.ru)*

Модели случайного блуждания играют очень важную роль в физике полимеров. В процессе теплового движения макромолекулы способны принимать большое число разнообразных состояний, многообразие которых можно охарактеризовать конформационным набором. Каждая конкретная конформация макромолекулы характеризуется собственным радиусом инерции, расстоянием между концами цепи, радиальной плотностью распределения сегментов, а конформационный набор макромолекулы, описываются средним радиусом инерции, средним расстоянием между концами цепи и средней радиальной плотностью распределения сегментов.

Целью настоящей работы являлось нахождение радиальной функции распределения плотности сегментов внутри клубка для макромолекулярных цепей различной длины и выявление влияния энергии межмолекулярных взаимодействий на ее изменения.

Методом Монте-Карло, было проведено численное моделирование конформаций макромолекул содержащих от 100 до 10000 сегментов и расчет их геометрических характеристик. Моделирование проводили на простой кубической решетке бесконечного размера. Статистическое усреднение составило 250 тыс. реализаций. Была получена зависимость среднего радиуса инерции  $R_g$  от числа звеньев для цепей различной длины. Для невзаимодействующей системы он линейно зависит от квадратного корня из числа звеньев, что согласуется с литературными данными. Так же были определены средние радиальные функции распределения плотности сегментов внутри клубка. Обнаружено, что плотность в центре клубка для невзаимодействующей

системы хорошо аппроксимируется следующим выражением 
$$\rho_{0,0} = \frac{2}{\sqrt{N}}$$

Чтобы связать структурные характеристики модельных полимерных цепей с энергетическими характеристиками исследовалось влияние энергии взаимодействия полимера с молекулами растворителя. Для этого была построена функция распределения числа контактов между сегментами полимера и молекулами растворителя (контактов типа «1-2») по всей рассчитанной выборке, т.е. пропорционально полному конформационному набору макромолекулы. Предполагали, что вероятность реализации различных макромолекулярных структур зависит от обменной энергии и числа межмолекулярных контактов. Для каждого количества контактов типа «1-2» рассчитывали усредненную радиальную функцию распределения плотности сегментов и средний радиус инерции. Затем, изменяя энергию взаимодействия были построены новые, измененные функции распределения, соответствующие заданным энергиям. При последующей статистической обработке была получена аппроксимационная зависимость, связывающая радиальную функцию распределения с энергией межмолекулярного взаимодействия.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта № 11-03-00785а)