

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ФИЗИКИ ПОЛИМЕРОВ И КРИСТАЛЛОВ

**ПЕРЕХОД КЛУБОК-ГЛОБУЛА В ОДИНОЧНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ  
ЦЕПИ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ  
МОНТЕ-КАРЛО**

**Курсовая работа:** студентки 2 курса 219 группы  
Мальцевой Дарьи Валерьевны

**Научный руководитель:** доктор физ.-мат. наук  
Иванов Виктор Александрович

Москва, 2014 г.

# 1 Содержание

1.1	Введение.....	2
1.2	Исследуемые модели блужданий.....	3-5
1.3	Фазовый переход клубок-глобула.....	5
1.4	Введение энергии жесткости.....	6
1.5	Полученные результаты и выводы.....	6-8
1.6	Литературный обзор.....	8

## 2 Введение.

Фазовые переходы в полимерных цепях вызывают большой интерес и ставят перед исследователями множество задач. Первоначально интерес к полимерным глобулам и переходам клубок — глобула был вызван потребностями молекулярной биофизики по той причине, что макромолекулы белков-ферментов обычно существуют в живой клетке в виде плотных глобул. При нагревании или изменении состава растворителя, в котором находятся белки, они могут денатурировать. Первых исследователей перехода клубок—глобула вдохновляла мысль, что изучение этого перехода поможет понять механизм денатурации белков. Впоследствии выяснилось, что нельзя провести однозначного соответствия между переходом клубок — глобула и денатурацией белков. Однако, сам по себе переход клубок—глобула весьма своеобразен и необычен. Многие распространенные явления в физике полимеров—от образования компактной формы ДНК до коллапса полимерных сеток — могут быть описаны как переходы типа клубок — глобула.

### **Цель работы.**

Целью данной работы является написание программы для изучения модели перехода клубок-глобула в двумерном пространстве на квадратной решетке, изучение интересных свойств глобулярного состояния при введении энергии жесткости.



3) Если реализовалась тупиковая ситуация (что является относительно редким событием), то данная попытка построить цепь отбрасывается.

Данный метод обладает преимуществом: если существует хотя бы одна возможность дальнейшего построения цепи, она будет реализована.

Шаги алгоритма:

- 1) На  $i$ -ом шаге определяется число  $k_i$  свободных узлов.
- 2) Шаг совершается в один из этих узлов с вероятностью  $\frac{1}{k_i}$ .
- 3) Конформация генерируется до тех пор, пока не будет достигнута заданная длина цепи  $N$ , или пока не реализуется тупиковая ситуация.

Вероятность построить некоторую конформацию длины  $N$ :

$$P = \text{const} \times \prod_{i=1}^N \frac{1}{k_i} \quad (2)$$

Вес, с которым конформация входит в формулу для средних значений наблюдаемых величин, обратно пропорционален этой вероятности.

Получается выборка *со смещением*, потому что конформации цепи не являются равновероятными. Для компенсации смещения выборки усреднение наблюдаемых величин  $A$  производится с весами  $W$ :

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_W = \frac{1}{\sum_{j=1}^M W_N^{(j)}} \times \sum_{j=1}^M A_j W_N^{(j)}; W_N^{(j)} = 1 \times \prod_{i=2}^N \frac{k_i^{(j)}}{k-1} \quad (3)$$

Замечание: при моделировании данным методом получают более компактные цепи.

### 3.1.3 Алгоритм Розенблютов с учетом энергии взаимодействия.

Для создания конфигурации одной полимерной цепи из  $N$  мономеров используется следующая схема:

1) Первый мономер помещается в случайное место на решетке, и его розенблютовский вес  $w_1 = k$ .

2) Для всех следующих сегментов  $i = 2, 3, \dots, N$  рассматриваются все  $k$  пробных позиций, соседних с сегментом  $i - 1$ . Энергия  $j$ -го пробного положения обозначается через  $\epsilon$ . Из  $k$  возможностей выбирается одна, например  $n$ , с вероятностью:

$$p^{(i)}(n) = \frac{\exp[-\epsilon]}{w_i} \quad (4)$$

, где  $w_i$  определяются как

$$w_i = \sum_{j=1}^k \exp[-\epsilon] \quad (5)$$

3) Второй шаг повторяется до тех пор, пока не вырастет вся цепь. После этого вычисляется розенблютовский вес конфигурации  $n$ :

$$W(n) = \prod_{i=1}^N \frac{w_i}{k} \quad (6)$$

Схема используется для создания большого числа конфигураций  $M$ , и средние свойства цепей рассчитываются следующим образом:

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_W = \frac{\sum_{n=1}^M A(n)W(n)}{\sum_{n=1}^M W(n)} \quad (7)$$

## 4 Фазовый переход клубок-глобула.

Если полимерные цепи не идеальны, при их описании необходимо учитывать взаимодействие далеких по цепи звеньев. Если определяющее значение имеет отталкивание звеньев, клубок набухает по сравнению с размерами идеального клубка. Если мономерные звенья притягиваются, полимерная цепь "конденсируется" на себя, образуя конформацию плотной структуры - так называемую полимерную глобулу. Иллюстрация перехода:

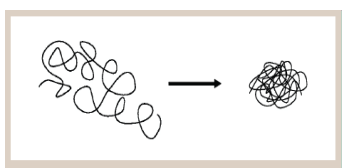


Рис. 2: Фазовый переход клубок-глобула в полимерной цепи

### 4.1 Понятие $\Theta$ - температуры.

При высоких значениях температуры  $T$  отношение  $\epsilon/kT$  много меньше 1, и имеет значение только отталкивание звеньев, клубок должен набухать. При низких значениях температуры клубок сжимается и формирует глобулу (происходит коллапс цепи).

Существует некоторое промежуточное значение температуры, при котором эффекты притяжения и отталкивания компенсируются. Эта температура называется  $\Theta$  — температурой.

Существование  $\Theta$ -точки, в которой взаимодействия звеньев не влияют на конформацию клубка, есть специфическое полимерное свойство, связанное с малостью концентрации звеньев в клубке.

Зависимость квадрата радиуса инерции  $R_i^2$  (квадрата расстояния между концами цепи) от длины цепи различны для состояний клубка и глобулы:

$$\begin{cases} R_i^2 \sim N^{1,5}, \epsilon = 0 (\text{клубок}) \\ R_i^2 \sim N, \epsilon_\theta = \Theta (\text{тета-точка}) \\ R_i^2 \sim N, \epsilon > \epsilon_\theta (\text{глобула}) \end{cases} \quad (8)$$

## 5 Введение энергии жесткости в полимерной цепи.

Жесткость в полимерной цепи можно ввести таким образом:

1) Пусть более выгодным является наращивание вдоль цепи, то есть  $\epsilon_g = -1$  для прямого хода и  $\epsilon_g = 0$  или  $+1$  для поворота на 90 градусов (получается жесткая цепь).

2) Если же выигрыш энергии происходит при повороте на прямой угол, а для направления вдоль цепи ввести энергию жесткости  $\epsilon_g = 0$  или  $+1$ , то получится цепь, которая образует более плотную структуру.

## 6 Полученные результаты и выводы.

Реализованные в программе методы дали следующие результаты:

1) Проверена зависимость, описываемая формулой (1), доли принятых попыток от длины цепи в методе простой выборки без возврата:

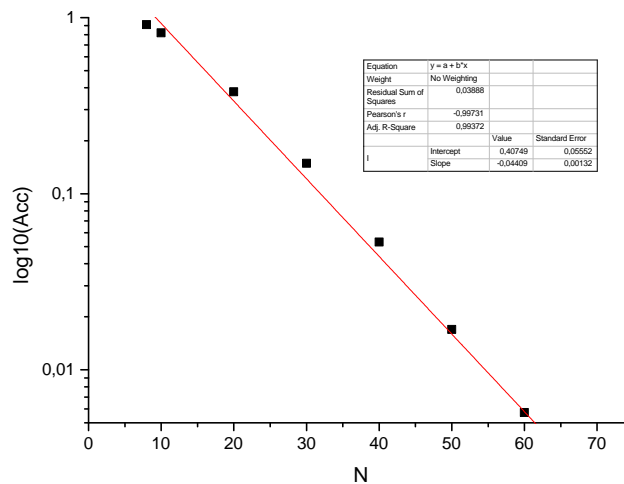


Рис. 3: Доля принятых попыток в зависимости от длины цепи

2) Построена зависимость доли принятых попыток от длины цепи в алгоритме Розенблютов, где построение цепи прекращается, если возникла тупиковая ситуация:

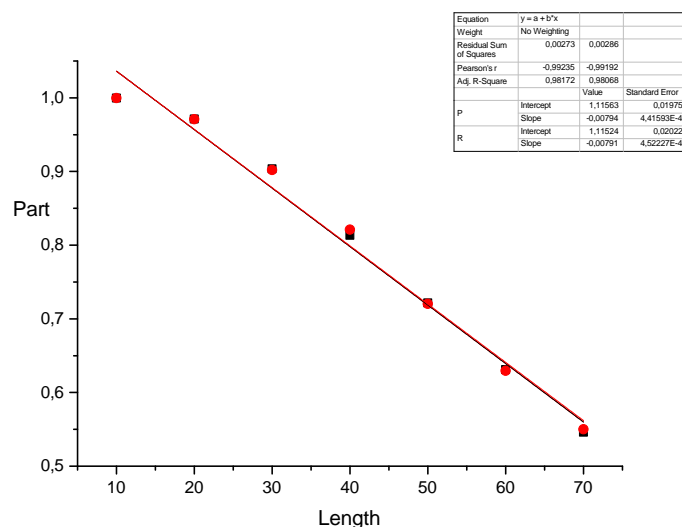


Рис. 4: Доля принятых попыток в зависимости от длины цепи

3) При введении энергии в полимерной цепочке строилась зависимость десятичного логарифма квадрата радиуса инерции при разных значениях энергии  $\epsilon$  от десятичного логарифма длины цепи  $N$ . При достижении тета-точки наклон, согласно (8) переставал меняться. Таким образом была определена тета-точка перехода клубок-глобула:  $\epsilon = (0.6 \pm 0.1)kT$ .

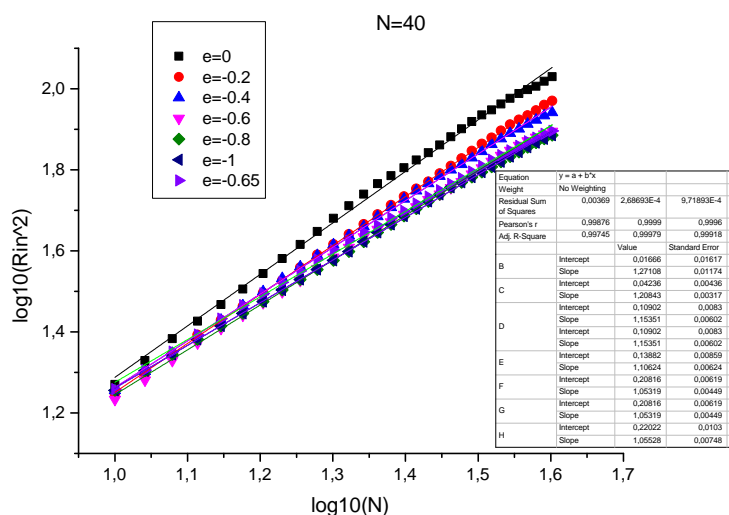


Рис. 5: Определение тета-точки перехода клубок-глобула

4) Для жесткоцепной молекулы ( $\epsilon_g = -1, \epsilon = -1$ ) зависимость квадрата радиуса инерции от длины цепи в дважды логарифмической шкале:



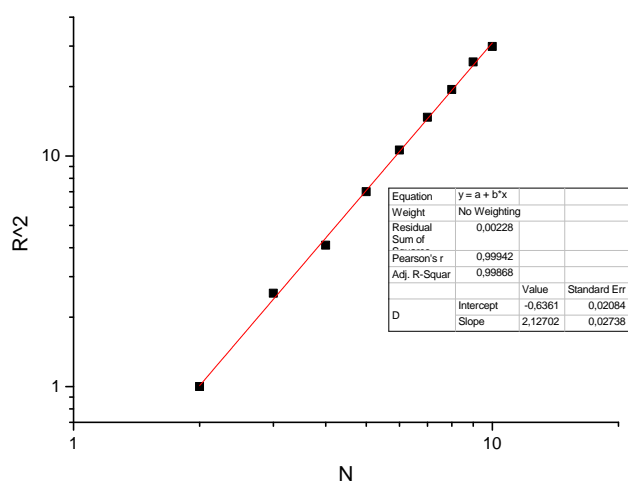


Рис. 6: Жесткая цепь

5) Примеры глобулярных состояний цепи длиной  $N=30$ , полученные при энергии жесткости  $\epsilon_g = -1$  и энергии притяжения  $\epsilon = -1$ :

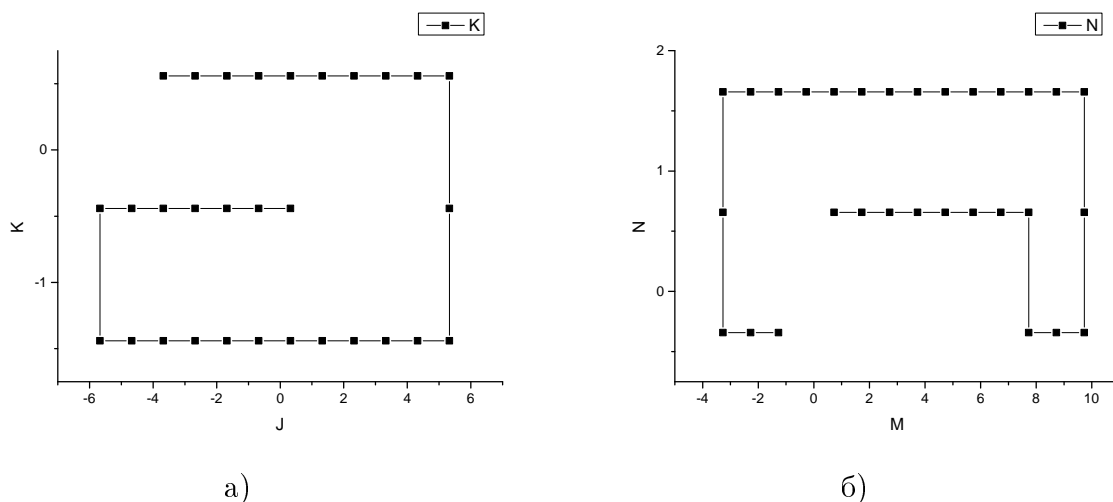


Рис. 7: Примеры глобул

## Список литературы

- [1] Даан Френкель, Беренд Смит "Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем".
- [2] Отв. редакторы В.А.Иванов, А.Л.Рабинович, А.Р.Хохлов "Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров".
- [3] А.Ю.Гросберг, А.Р. Хохлов "Физика в мире полимеров".