

УДК 577.1

В.В.Жилин (5 курс, каф. ФМиКТМ), А.И.Мелькер, д.ф.-м.н., проф.

### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ ХОЛЕСТЕРИНА И ЕГО ЭФИРОВ МЕТОДОМ «ЗАРЯДОВ НА СВЯЗЯХ»

Целью данной работы являлся расчет равновесных конфигураций молекул холестерина и его эфира, холестерилнонанаата, при комнатной температуре методом «зарядов на связях», а также сравнение полученных результатов с результатами аналогичного моделирования методом молекулярной динамики.

В центре каждой ковалентной связи был жестко закреплен заряд, равный двум зарядам электрона. Учитывались следующие типы взаимодействий: взаимодействия атомов, разделенных одной и двумя ковалентными связями (они описывались потенциалами в форме Морзе), взаимодействия дальнего порядка (силы Ван-дер-Ваальса), кулоновское взаимодействие электронов без радиуса обрезания.

В результате моделирования были получены равновесные конфигурации молекул холестерина и его эфира. Результаты моделирования методом «зарядов на связях» качественно и в значительной мере количественно совпали с результатами моделирования методом молекулярной динамики.

Был сделан вывод о применимости метода «зарядов на связях» к компьютерному моделированию молекул эфиров холестерина. Возможность этого метода учитывать воздействие внешних электрических и электромагнитных полей позволит моделировать поведение этих молекул в различных внешних условиях. Так как некоторые эфиры холестерина имеют жидкокристаллическую фазу, моделирование этих молекул позволит получить информацию о процессах, протекающих в жидких кристаллах при различных значениях температуры и внешних полей.