

## МОДЕЛЬ ДЕТЕРМИНИРОВАННОЙ ДИНАМИКИ МОЛЕКУЛ СВЯЗАННОЙ ВОДЫ

**Соловей А. Б., Лобышев В. И.**

Специализированный учебно-научный центр МГУ им. М.В.Ломоносова, 121352, Россия,  
Москва, ул. Кременчугская, д. 11. E-mail: [soloveybird@gmail.com](mailto:soloveybird@gmail.com)

При изучении структуры связанной воды в биофизике важное место имеет точное знание о координатах молекул, поскольку от их геометрического положения и, следовательно, энергетических характеристик, зависит структура и функция самой биологической системы. Статические, равновесные координаты молекул воды в биологической системе часто могут быть измерены непосредственно экспериментально, например, с помощью метода рассеяния рентгеновского излучения. В свою очередь, динамические структурные характеристики связанной воды часто могут быть измерены только как интегральные термодинамические или кинетические факторы.

Для моделирования как свободной так и связанной воды в настоящее время широко используется метод молекулярной динамики. В нем для получения координат частиц используется классическая механика, а взаимодействие между частицами как правило представлено парным потенциалом. Для получения термодинамических или структурных характеристик системы используется молекулярно-динамическая траектория на большом промежутке времени (порядка наносекунды). Аналогично можно сделать выводы о системе частиц с помощью моделирования методом Монте-Карло. Моделирование с помощью потенциала всегда неточно, поскольку истинное взаимодействие между молекулами сложно. Об этом свидетельствует количество существующих на настоящее время потенциалов для моделирования воды.

Ключевым фактором в методе классической молекулярной динамики является вид потенциала взаимодействия. Из него выводятся непосредственно термодинамические величины самой системы, также можно получить геометрию и топологию равновесных локальных структур, содержащих небольшое число частиц. Межчастичная (например водородная) связь возникает как равновесное соединение частиц в потенциале, связь в молекулярной динамике - это следствие вида потенциальной функции, например того факта, что у потенциальной функции есть локальный минимум.

В нашей детерминированной модели межмолекулярная водородная связь, ее наличие или отсутствие является основополагающим фактором. Пусть нет возможности знать вид межчастичного потенциала, нет явной аналитической записи потенциальной функции. Но нам известна точно равновесная кристаллическая структура. Для некристаллической структуры, жидкого или связанного состояния, известно, что молекулы воды в основном связаны водородными связями друг с другом или с другими молекулами. Эти связи характеризуются определенной энергией и геометрией: расстоянием между частицами, количеством связей у одной частицы, допустимым углом между связями. Наша динамическая модель основывается на позициях детерминизма статической модели связанной воды Н. А. Бульенкова [2].

Динамика такой связанной детерминированной системы - это динамика сетки связей, изменение ее топологии, динамика переключения связей. При этом координаты частиц заданы точно, они не подвержены ошибкам интегрирования, связанным с точностью вычисления. Можно сказать, что такая динамика - это динамика целых, а не вещественных координат, поэтому все вычисления точны. Такое понимание динамики отличается от классического метода, где центральным понятием является потенциал, а из него следует траектория, то есть изменение координат частиц со временем, вычисляемое интегрированием уравнений движения.

Для моделирования динамики связей в некристаллической системе, которой является как жидкая так и связанная вода, используется метод проекции из пространства более высокой размерности [1]. Изменение параметров системы со временем моделируется движением двух "параллельных" подпространств в пространстве большой размерности. В пространстве большой размерности молекулы расположены в "кристаллической решетке" - все связи ненапряжены и соответствуют кристаллу. При проецировании из большой размерности в меньшую связи и межмолекулярные расстояния искажаются. Те молекулы, которые попадают между этими плоскостями проецируются в пространство меньшей размерности. Если проективное пространство - трехмерное, а "кристаллическое" пространство - как минимум четырехмерно, то при движении трехмерной гиперплоскости

по "кристаллическому" четырехмерному пространству на ней отображаются искаженные "проекции" кристаллической структуры. Динамика этих проекций и есть модель динамики связанной системы, в частности, связанной воды.

Акт появления и разрыва связи между молекулами - дискретный акт. В нашей модели этот акт связан с выходом молекулы из пространства между гиперплоскостями и заменой этой молекулы на другую, вошедшую между гиперплоскостями. Это событие аналогично "скачкам" о которых было писал Я. И. Френкель в работе [3]. Благодаря кристаллической структуре пространства, из которого идет проецирование, движения частиц и динамика связей скоррелированы и можно сказать, что присутствует коллективное движение связанных частиц и коллективные переключения самих связей.

## **THE DETERMINATED DYNAMICS MODEL OF BONDED WATER MOLECULES**

***A.B. Solovey, V. I. Lobyshev***

AESC of M. V. Lomonosov Moscow State University, ***E-mail:*** [soloveybird@gmail.com](mailto:soloveybird@gmail.com)

### **Литература**

1. V. E. Korepin, F. Gaehler and J. Rhyner // Quasiperiodic tilings: a generalized grid-projection method. Acta Crystallographica, 1988, v. A44, pp. 667-672,
2. Н. А. Бульенков // Самоорганизующиеся триплетные структуры идеальных фракталов связанной воды с симметрией D<sub>3</sub> и T, Кристаллография, 1990, т 35(1), с. 147-154.
3. Я. И. Френкель // Кинетическая теория жидкостей. Л., Наука, 1975.