

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРОВ

П. Г. ХАЛАТУР

Тверской государственный университет

А. Р. ХОХЛОВ

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

COMPUTER SIMULATION OF POLYMERS

P. G. KHALATUR, A. R. KHOKHLOV

Computer simulation is widely used to predict the equilibrium structure and dynamic properties of polymers. Both the Monte Carlo and molecular dynamics methods, as applied to complex polymer systems, are discussed.

Компьютерное моделирование широко используется для предсказания равновесной структуры и динамических свойств полимеров. В статье рассмотрено применение методов Монте-Карло и молекулярной динамики для изучения сложных полимерных систем.

Хорошая теория сложных систем должна представлять собой лишь хорошую “карикатуру” на эти системы, утрирующую те свойства их, которые являются наиболее типическими, и умышленно игнорирующую все остальные – несущественные свойства.

Я.И. Френкель

ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно практическое значение синтетических полимеров и то, какую роль играют в биологических системах основные природные макромолекулы: белки, нуклеиновые кислоты, полисахариды. Хотя химическое строение макромолекул отличается чрезвычайно широким разнообразием, можно выделить несколько типических черт, составляющих “групповой портрет” большинства соединений данного класса. Прежде всего к этим особенностям следует отнести размеры полимерных молекул. Многие из них насчитывают сотни тысяч, а порой и миллионы атомов. Поэтому даже об отдельно взятой макромолекуле часто уместно говорить как о молекулярной системе. Вторая особенность — это способность полимеров менять свою конформацию (то есть форму молекулы) в широких пределах. Именно это обстоятельство определяет уникальные свойства синтетических полимеров и различные функции биомacroмолекул. Еще одной важной чертой группового портрета полимеров, отличающей их от таких же по химическому составу низкомолекулярных соединений, является аномально низкая энтропия этих систем и как следствие — аномально высокая восприимчивость к разного рода воздействиям. Это обусловлено тем, что из-за ковалентной связанности звенья макромолекулы не могут двигаться независимо друг от друга. Понимание роли названных выше (а также ряда других) факторов составляет предмет теоретических разделов науки о полимерах.

Говоря о развитии теории полимеров в ретроспективном плане, можно выделить первый этап, охватывающий работы до конца 60-х годов XX века и завершившийся созданием конформационной статистики

www.issep.rssi.ru

макромолекул, основы которой изложены в трех классических монографиях [1–3]. За исследования в этой области американский физикохимик, профессор Стэнфордского университета Пол Флори был удостоен Нобелевской премии по химии в 1974 году. Методы конформационной статистики позволяют установить связь между химическим строением и конформационными свойствами отдельных макромолекул в предельно разбавленном идеальном растворе. Современный этап развития теории начался в 70-е годы после того, как в науку о полимерах вошли новые представления, в частности идеи и методы флуктуационной теории фазовых переходов и физики твердого тела. Решающий вклад внесли здесь работы двух выдающихся физиков-теоретиков – француза П.-Ж. де Жена и нашего соотечественника И.М. Лифшица. За создание изящной и наглядной методологии описания равновесных и динамических свойств полимеров, названной теорией скейлинга, де Жен получил Нобелевскую премию по физике.

В предисловии к своей известной монографии [4] де Жен подчеркивает три главных обстоятельства, определивших прогресс науки о полимерах. Во-первых, это широкое применение таких мощных экспериментальных методов исследования, как, например, метод рассеяния нейтронов. Во-вторых, как уже отмечалось, это привлечение новейших теоретических концепций из других областей физики. И наконец, третье обстоятельство связано с использованием методов машинного моделирования или, как часто говорят, компьютерного эксперимента.

ЧТО ТАКОЕ КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Основной задачей статистической теории является вычисление средних значений различных величин, характеризующих поведение системы в состоянии равновесия. Существуют два подхода к решению этой общей задачи.

В первом случае среднее значение $\langle A \rangle$ некоторого свойства $A(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, которое предполагается зависящим от совокупности координат $\{\mathbf{r}\}$ и скоростей $\{\mathbf{v}\}$ частиц, определяют путем усреднения множества “мгновенных” значений $A[\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t)]$, наблюдаемых в последовательные моменты времени t . Такой подход, называемый усреднением по времени, исходит из того, что нам известны законы движения частиц системы.

Другой путь к вычислению средних значений параметров системы был намечен Больцманом, а затем развит в стройную теорию Гиббсом. Идея заключается в том, что наблюдаемое свойство рассматривают не как среднее по времени, а как среднее по множеству различных состояний системы, которые возникают с определенной вероятностью. Такой подход называют ус-

реднением по ансамблю. Вероятность (или частота) возникновения того или иного состояния пропорциональна его статистическому весу $e^{-U/kT}$, где U – потенциальная энергия данной конфигурации, k – константа Больцмана, T – абсолютная температура.

Оба фундаментальных принципа определения средних могут быть положены в основу вычислительных схем, реализуемых на компьютере. При этом необходимо знать лишь способ расчета потенциальной энергии системы как функции координат $\mathbf{r}$.

Рассмотрим систему, состоящую из заданного числа частиц (атомов или молекул). В классической механике движение каждой частицы i с массой m_i может быть описано уравнением Ньютона

$$m_i \mathbf{a}_i(t) = \mathbf{f}_i(t) \quad (\text{масса} \times \text{ускорение} = \text{сила}). \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{f}_i(t)$ – сила, действующая в данный момент времени t на частицу i со стороны всех остальных частиц системы (эта сила связана с потенциальной энергией известным соотношением: $\mathbf{f}_i(t) = -\partial U / \partial \mathbf{r}_i$); ускорение же определяется как $\mathbf{a}_i(t) = d\mathbf{v}_i(t)/dt = d^2\mathbf{r}_i(t)/dt^2$. Если эти производные заменить их конечно-разностными аналогами, то систему уравнений Ньютона, записанных для всех частиц, можно решить на компьютере. Иными словами, зная координаты частиц $\mathbf{r}(t)$ и отвечающие им силы $\mathbf{f}(t)$ в некоторый момент времени t , можно через небольшой промежуток времени Δt найти новые координаты $\mathbf{r}(t + \Delta t)$ и силы $\mathbf{f}(t + \Delta t)$ в следующий момент времени $t + \Delta t$ и т.д. шаг за шагом. Вычисление на каждом шаге интересующего нас параметра A позволяет проследить его эволюцию во времени, а усреднение по достаточно большому числу сделанных шагов дает искомые равновесные свойства. Такую схему расчета принято называть численным экспериментом динамического типа или методом молекулярной динамики (МД). Используются также различные варианты метода МД, в которых наряду с внутренними силами, обусловленными взаимодействием атомов друг с другом, включаются те или иные внешние силы. Подобные схемы моделирования составляют группу методов неравновесной молекулярной динамики.

Вычислительную схему, в основе которой лежит альтернативный (вероятностный) принцип определения средних значений, называют методом статистических испытаний или методом Монте-Карло (МК). В этом методе переходы между состояниями системы осуществляются следующим образом. На каждом шаге случайно выбранная частица (или группа частиц) перемещается на небольшое расстояние в случайном направлении. Это приводит к изменению потенциальной энергии системы на некоторую величину ΔU , которая и определяет вероятность перехода $p = e^{-\Delta U/kT}$ из старого в новое состояние. Интересующие характеристики

вычисляются на каждом шаге и усредняются по большому числу сделанных шагов.

Нетрудно понять, что в обоих рассмотренных методах отсутствуют какие-либо физические упрощения. Эти методы основываются на весьма общих принципах классической физики и в сущности представляют собой лишь математическую (численную) реализацию соответствующих фундаментальных подходов к определению макроскопических характеристик системы исходя из заданных микроскопических законов взаимодействия частиц.

Определение 1. Понятие “модель системы” заключается в выборе правил, описывающих взаимодействие частиц между собой и/или с внешними полями, то есть в формулировке вида и способа вычисления функции потенциальной энергии.

Определение 2. Компьютерная имитация методами молекулярной динамики или Монте-Карло модели физической системы с целью изучения ее характеристик в зависимости от заданных параметров представляет собой численный (компьютерный) эксперимент с этой моделью.

В представленном выше определении термин “эксперимент” имеет двойственный смысл. С одной стороны, в компьютерном эксперименте так же, как и в реальном, исследуются отклики системы на те или иные изменения параметров (температура, плотность, состав) либо на внешние воздействия (механические, электрические, магнитные поля). Разница состоит лишь в том, что экспериментатор имеет дело с реальной системой, тогда как в компьютерном эксперименте рассматривается поведение математической модели реального объекта. С другой стороны, возможность получать строгие результаты для четко определенных моделей позволяет использовать компьютерный эксперимент как источник информации для проверки предсказаний аналитических теорий и, следовательно, в этом качестве результаты моделирования играют роль того же эталона, что и опытные данные.

Из сказанного также вытекает возможность двух различных подходов к постановке компьютерного эксперимента, что обусловлено характером решаемой задачи и тем самым определяет выбор модельного описания.

Во-первых, расчеты методами МД или МК могут преследовать чисто утилитарные цели, связанные с предсказанием свойств конкретной реальной системы и в их сопоставлении с физическим экспериментом. В этом случае можно делать интересные прогнозы и проводить исследования в таких экстремальных условиях (скажем, при сверхвысоких давлениях или температурах), когда реальный эксперимент по различным причинам неосуществим либо требует чересчур больших материальных затрат. Моделирование на компьютере

часто является вообще единственным путем получения наиболее подробной (микроскопической) информации о поведении сложной молекулярной системы. В последние годы особенно наглядно это показали численные эксперименты динамического типа с различными биосистемами: глобулярными белками в нативном состоянии, фрагментами ДНК и РНК, липидными мембранами. В отдельных случаях полученные данные заставили пересмотреть или существенно изменить имевшиеся ранее представления о структуре и функционировании этих объектов. Следует, конечно, иметь в виду, что при моделировании методами МД или МК молекула трактуется не как совокупность электронов и ядер, подчиняющаяся законам квантовой механики, а как система связанных классических частиц — атомов. Такая модель называется механической моделью молекулы.

Другой подход к постановке компьютерного эксперимента направлен на понимание общих (универсальных или модельно-инвариантных) закономерностей поведения изучаемой системы, то есть таких закономерностей, которые определяются лишь наиболее типическими особенностями данного класса объектов, но не деталями химического строения отдельно взятого соединения. Можно сказать, что в этом случае компьютерный эксперимент нацелен на установление функциональных связей, а не на расчет числовых параметров. С точки зрения данного подхода компьютерное моделирование является теоретическим инструментом, который прежде всего позволяет проверить выводы существующих аналитических методов теории или дополнить их предсказания. Подобное взаимодействие между аналитической теорией и компьютерным экспериментом бывает особенно плодотворным, когда в обоих подходах удастся использовать идентичные модели. Наиболее типичным примером такого рода обобщенных моделей полимерных молекул может служить решеточная модель. Она лежит в основе многих теоретических построений, в частности связанных с решением классической задачи физикохимии полимеров о влиянии объемных взаимодействий на конформацию гибкой полимерной цепи. Под объемными взаимодействиями обычно подразумевают короткодействующие силы отталкивания, которые возникают между удаленными вдоль по цепи звеньями, когда они сближаются в пространстве за счет случайных изгибов макромолекулы. В решеточной модели реальную цепь рассматривают как ломаную траекторию, которая проходит через узлы правильной решетки заданного типа: кубической, тетраэдрической и др. Занятые узлы решетки соответствуют полимерным звеньям (мономерам), а соединяющие их отрезки — химическим связям в скелете макромолекулы (рис. 1). Запрет самопересечений траектории (или, иными словами, невозможность одновременного попадания

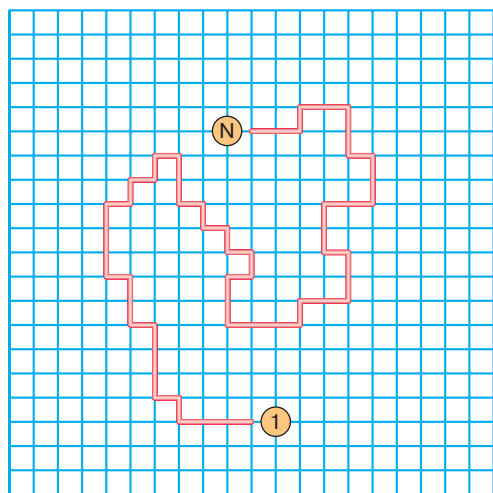


Рис. 1. Решеточная модель полимерной цепи

двух и более мономеров в один решеточный узел) моделирует объемные взаимодействия. Различные способы размещения цепи на решетке отвечают различным конформациям, по которым проводится усреднение требуемых характеристик. Можно также ввести дополнительно энергию притяжения между теми парами звеньев, которые попали в соседствующие узлы решетки. Варьируя эту энергию, в компьютерном эксперименте удается, в частности, исследовать интересное явление, называемое переходом “клубок — глобула”, когда за счет сил внутримолекулярного притяжения развернутый полимерный клубок сжимается и превращается в компактную структуру — глобулу, напоминающую жидкую микроскопическую каплю (см. рис. 2). Понимание деталей такого перехода важно для развития наиболее общих представлений о ходе биологической эволюции, приведшей к возникновению глобулярных белков.

В заключение этого раздела заметим, что непрерывным атрибутом современного компьютерного эксперимента являются хорошо развитые средства машинной графики. Поскольку в ходе моделирования координаты всех атомов известны, можно проследить за поведением любой части системы и тем самым появляется уникальная возможность в буквальном смысле увидеть (а часто и понять) сложные процессы, протекающие в микроскопических объемах вещества в течение очень малых промежутков времени.

КОГДА НЕОБХОДИМ КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Квантовая химия позволяет рассчитать многие свойства молекул в принципе с любой точностью. Однако чаще всего нас интересует поведение не индивидуальных молекул, а молекулярных ансамблей, то есть коллек-

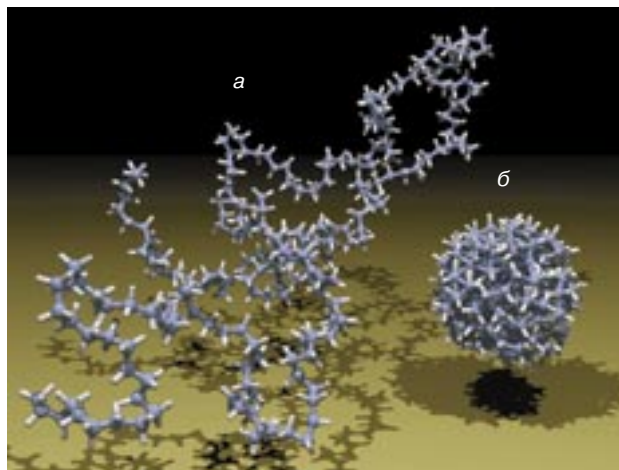


Рис. 2. Развернутая (а) и сжатая (б) конформации 1000-звенной полиэтиленовой цепи, полученные при моделировании методом Монте-Карло. Атомы углерода изображены голубым цветом, атомы водорода — серым. Этот и последующие рисунки выполнены с помощью средств трехмерной (3D) молекулярной графики

тивные свойства, например: температура плавления или стеклования вещества, его плотность, диффузионные характеристики. Под ансамблем можно понимать как несколько десятков молекул, организованных в виде кластера, так и макроскопическую совокупность, в которой количество молекул соответствует числу Авогадро $N_A \approx 10^{23}$. В данное время методами квантовой химии можно делать достаточно надежные расчеты лишь для молекулярных систем с числом атомов до одной-двух сотен. Этого явно недостаточно для предсказания коллективных свойств или характеристик даже отдельно взятых макромолекул. Кроме того, следует иметь в виду, что полимеры всегда находятся в окружении плотной среды — низкомолекулярного растворителя или других макромолекул, — которую также необходимо принимать во внимание. Переход на язык классической физики, то есть отказ от рассмотрения молекулы как электронно-ядерной системы, позволяет решающим образом расширить круг явлений и объектов, доступных исследованию в компьютерном эксперименте. При расчетах методами Монте-Карло или молекулярной динамики существующие суперкомпьютеры способны оперировать системами, в которых число частиц достигает нескольких миллионов. Даже на современных персональных компьютерах удастся моделировать многие коллективные свойства систем, включая полимерные.

Известны свойства, называемые термодинамическими. Они зависят от температуры (вспомним давление, коэффициент теплового расширения, параметры

фазовых равновесий). Квантовая химия описывает молекулы при абсолютном нуле температуры. Влияние теплового движения атомов должно учитываться с помощью иных теоретических подходов. В более общем смысле можно сказать, что, за исключением лишь сравнительно небольшого числа идеализированных ситуаций, поведение любой реальной системы определяется ее свободной энергией, которая складывается из энтальпийного (энергетического) и энтропийного вкладов. Последний связан с числом конформаций, которое способна принимать индивидуальная молекула, и числом конфигураций всего молекулярного ансамбля. Наблюдаемые на опыте свойства всегда являются результатом усреднения по множеству различных состояний системы. Как правило, только такие свойства (например, среднеквадратичные размеры полимерного клубка, среднеквадратичный дипольный момент и поляризация, характеристики светорассеяния) представляют интерес для полимерных систем. Компьютерный эксперимент нацелен на получение именно такой информации.

Наконец, выделим обширную группу динамических (зависящих от времени) характеристик. Они определяют диффузию, вязкость, коэффициенты седиментации, теплопроводность, отклики системы на внешние воздействия. Кроме того, для полимеров важно знать реологические свойства, включающие поведение растворов и расплавов при течении, сдвиговых деформациях и т.д. Время не входит в квантово-химические уравнения. Следовательно, если необходимо предсказание таких свойств исходя из молекулярных параметров, должен использоваться численный эксперимент динамического типа.

НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Одним из наиболее важных результатов компьютерного моделирования полимеров стало понимание того факта, что для макромолекул с сильными объемными взаимодействиями крупномасштабные равновесные и динамические характеристики, наблюдаемые в растворах, являются универсальными степенными функциями длины цепи N и концентрации полимера C вне зависимости от каких-либо структурных деталей рассматриваемой модели. Примерами могут служить универсальные соотношения для среднеквадратичных размеров полимерного клубка: $\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu}$ (в сильно разбавленном растворе) и $\langle R^2 \rangle \sim NC^{(2\nu-1)/(1-d\nu)}$ (при умеренных концентрациях). В этих формулах фигурирует так называемый критический индекс $\nu \approx 3/(2+d)$, который определяется только евклидовой размерностью пространства d , а символ $\sim$ означает пропорциональную связь. Такое же универсальное поведение характерно для многих других систем (например, для магне-

тиков) вблизи точек фазового перехода, когда имеются крупномасштабные флуктуации. В случае длинных цепей сильные флуктуации испытывает плотность звеньев внутри полимерного клубка, что обусловлено конформационными изменениями макромолекулы. В развернутых конформациях, подобных представленной на рис. 2, а, средняя плотность звеньев в клубке очень мала, однако она способна достигать высоких значений в случайно возникших сжатых конформациях (рис. 2, б). Осознанию глубокой аналогии между свойствами полимерных растворов и систем, флуктуирующих вблизи точек фазового перехода, в немалой степени способствовали именно компьютерные эксперименты с простыми моделями, а соответствующие выводы легли впоследствии в основу некоторых современных теоретических построений [4, 5].

Важные результаты получаются при использовании численных имитационных методов для описания более сложных объектов и явлений: адсорбции полимеров на поверхности, эффектов структурообразования в концентрированных растворах и расплавах (включая эффекты жидкокристаллического упорядочения жесткоцепных полимеров), механизма упругой деформации полимерных сеток, реологического поведения растворов и расплавов, влияния полимерных добавок на агрегативную устойчивость дисперсий и т.д. Наряду с линейными полимерами проводится моделирование циклических и заузленных макромолекул, гребнеобразных полимеров и других объектов со сложной архитектурой, например сверхразветвленных древовидных полимеров, называемых дендримерами. Примеры структур двух последних типов показаны на рис. 3.

В последние годы большое внимание уделяется вопросам, связанным с пониманием механизмов самоорганизации полимеров. Такое явление весьма характерно для многих сополимеров, в состав которых входят участки (блоки), построенные из звеньев различной химической природы, например из звеньев, обладающих гидрофильными и гидрофобными свойствами. За счет несовместимости (взаимного отталкивания) разных блоков происходит их сегрегация, результатом которой может быть микрофазное разделение, сопровождающееся формированием мицеллярных или иных (часто довольно экзотических) типов организованных супрамолекулярных структур. Варьируя природу и распределение функциональных групп, а также строение макромолекул, синтезируемых в лаборатории или моделируемых на компьютере, удается гибко управлять процессом молекулярной самосборки и наблюдать возникновение сложных регулярных наноструктур с уникальными свойствами.

Значительные успехи были достигнуты при компьютерном моделировании биополимерных систем. В

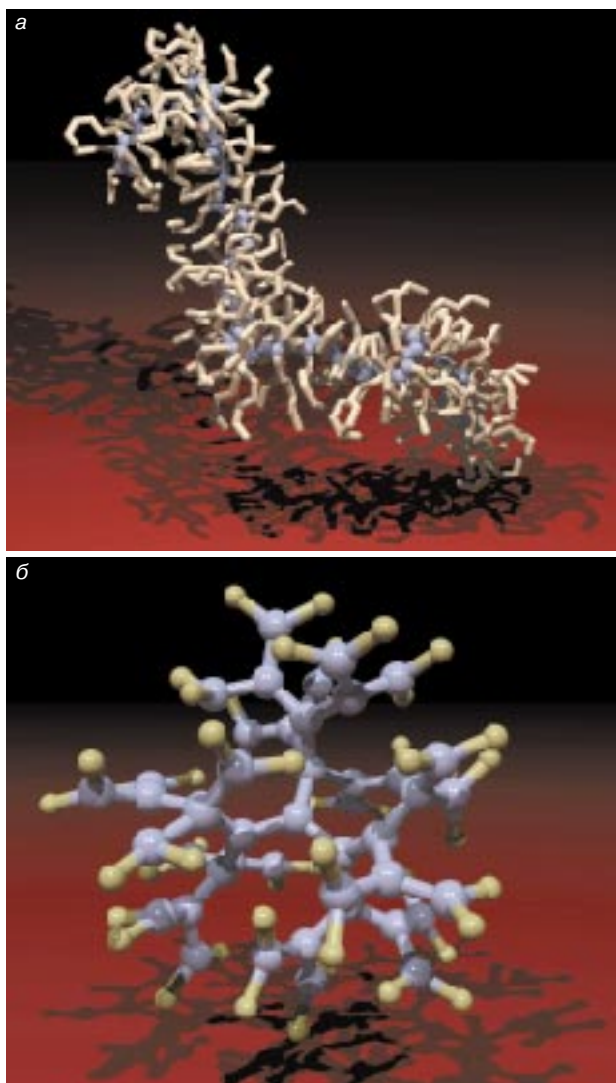


Рис. 3. Смоделированные на компьютере структуры гребнеобразного полимера (а) и дендримера (б)

настоящее время бесспорным фактом считается то, что функционирование биомакромолекул так или иначе связано с их конформационными изменениями. Понимание такой связи на детальном — атомном уровне составляет задачу моделирования в данной области. Обычно с этой целью используется метод МД. Основная часть расчетов выполнена для глобулярных белков в нативном состоянии и олигонуклеотидов (или фрагментов ДНК). Моделируемый объект помещается в ячейку, содержащую молекулы воды. Для ДНК, которая является полиэлектролитом, учитывается также наличие противоположно заряженных ионов Na^+ . Примеры таких систем, моделировавшихся на компьютере, показаны на рис. 4 и 5. В сложной иерархии динамиче-

ских процессов, наблюдаемых в расчетах для белков, можно выделить три основных типа движений: 1) быстрые тепловые флуктуации атомов и небольших групп возле положений равновесия с амплитудами до 0,1 нм и характерным временем до 10 пс ($1 \text{ пс} = 10^{-12} \text{ с}$); 2) быстрые, но редкие перемещения фрагментов макромолекулы; 3) коллективные конформационные перестройки, затрагивающие участки вторичной структуры, домены, субъединицы белковой глобулы. Еще сравнительно недавно было принято рассматривать белок как



Рис. 4. Глобулярный белок гидролаза (*serine protease*) в водном окружении. Структура белка (β -слои, α -спирали и неструктурированные участки полипептидной цепи) представлена в схематическом виде

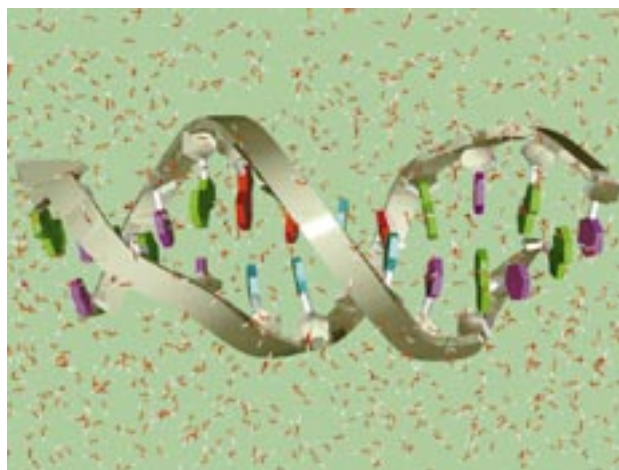


Рис. 5. Фрагмент молекулы ДНК в водном окружении. Пары нуклеотидных оснований изображены схематически в виде шестигранных призм; две цепи остова нуклеиновой кислоты, спирально скрученные снаружи вокруг центральной оси, представлены в виде лент

жесткую статичную конструкцию. Однако на основе экспериментальных наблюдений и численного моделирования постепенно сформировалась новая — динамическая концепция структуры белка. Согласно этой концепции, на потенциальной поверхности глобулярного белка (вблизи наиболее устойчивого нативного состояния) имеется множество областей, отвечающих локальным минимумам потенциальной энергии. В каждой из этих областей атомы совершают быстрые колебания, которые близки к гармоническим. Поскольку в таких состояниях глобула пребывает большую часть всего времени, ее поведение подобно классическому твердому телу с апериодической структурой. Через временные интервалы порядка 10^2 пс система может спонтанно “перепрыгивать” в ближайшую соседнюю область на потенциальной поверхности. Подобные прыжки осуществляются очень быстро (в течение нескольких пикосекунд), являются обратимыми и вызывают довольно значительные кооперативные перестройки структуры (которые сопряжены, например, с разрывом одной части внутриглобулярных водородных связей и образованием их в других местах глобулы). Удастся наблюдать низкочастотные скоррелированные движения вдоль α -спиралей наподобие мехов аккордеона. Конечно, не все типы движений имеют биологический смысл. Однако не исключено, что гетерогенная структура белка, сформировавшаяся в ходе эволюции, predisposed именно к тем типам движений, которые соответствуют заложенным природой функциям. Иными словами, устройство вторичной структуры белка таково, что оно преобразует на первый взгляд хаотичные движения в “осмысленные”, то есть необходимые для выполнения белком в активном состоянии, например каталитических функций. В этом состоит суть так называемой гипотезы направленных флуктуаций. Частичным ее подтверждением может служить объяснение того, каким образом проникают к активному центру (гему) миоглобина или гемоглобина и удаляются наружу низкомолекулярные лиганды типа CO_2 и O_2 . Как следует из молекулярно-динамического расчета, именно скоординированные перемещения фрагментов макромолекулы открывают и закрывают каналы доступа к активному центру белка.

На пути компьютерной имитации реалистичных моделей биосистем сделаны пока лишь первые шаги, однако несомненно, что объем информации, приближающей нас к пониманию молекулярных основ важнейших биохимических процессов, будет в ближайшее время стремительно нарастать.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Если рассматривать математическое моделирование в широком смысле, можно сказать, что этот подход при-

меняется в естественных науках уже более двухсот лет (начиная, по-видимому, с работ Эйлера). Однако лишь после появления ЭВМ и накопления экспериментальных и теоретических данных о взаимодействии атомов методы численного моделирования стали использоваться для изучения молекулярных систем. Прежде всего это коснулось простых жидкостей, для которых были получены важные сведения, сыгравшие существенную роль в формировании современных представлений о структуре и динамике конденсированных систем. Вслед за этим началось активное моделирование более сложных молекул и полимеров, а впоследствии и объектов живой природы.

Компьютерное моделирование произвело своего рода революцию в науке, сгладив исторически сложившееся деление естественных наук на экспериментальное и теоретическое направления. Несомненно, что по мере совершенствования вычислительной техники роль этого подхода будет все более возрастать.

РЕКОМЕНДУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Волькенштейн М.В. Конфигурационная статистика полимерных цепей. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1959.
2. Бириштейн Т.М., Птицын О.Б. Конформации макромолекул. М.: Наука, 1964.
3. Флори П. Статистическая механика цепных молекул. М.: Мир, 1971.
4. Жен П. де. Идеи скейлинга в физике полимеров. М.: Мир, 1982.
5. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989.
6. Берлин Ал.Ал., Балабаев Н.К. Имитация свойств твердых тел и жидкостей методами компьютерного моделирования // Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 11. С. 85–92.
7. Немухин А.В. Компьютерное моделирование в химии // Там же. 1998. № 6. С. 48–52.
8. Khalatur P.G. Computer Simulations of Polymer Systems // Mathematical Methods in Contemporary Chemistry. N.Y.: Gordon and Breach Publ., 1996.

Рецензент статьи Ал.Ал. Берлин

Павел Геннадьевич Халатур, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физической химии Тверского государственного университета. Область научных интересов — физикохимия полимеров, компьютерное моделирование молекул. Автор более 200 научных статей и нескольких учебных пособий.

Алексей Ремович Хохлов, доктор физико-математических наук, профессор, действительный член РАН, зав. кафедрой физики полимеров и кристаллов МГУ, зав. лабораторией физикохимии полимеров Института элементоорганических соединений РАН. Область научных интересов — статистическая физика макромолекул, компьютерное моделирование. Автор более 200 научных статей и нескольких монографий.