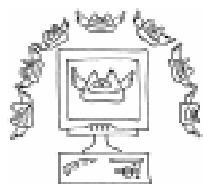


*Комолкин Андрей Владимирович,  
Эльц Екатерина Эдуардовна*

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА: ОТ МОДЕЛИ К ВИЗУАЛИЗАЦИИ

*«Явления со всех сторон окружают нас, но они носят шапки-невидимки, и мы не замечаем их. Посредством гипотезы мы срываем с них эти шапки-невидимки».*

*М. Нордау*



### КОМПЬЮТЕРЫ И МОЛЕКУЛЫ

Можно ли увидеть молекулу? Как выглядят и взаимодействуют между собой молекулы и атомы? Чем больше узнавали об окружающем мире люди, тем больше появлялось у них вопросов, тем глубже им хотелось заглянуть.

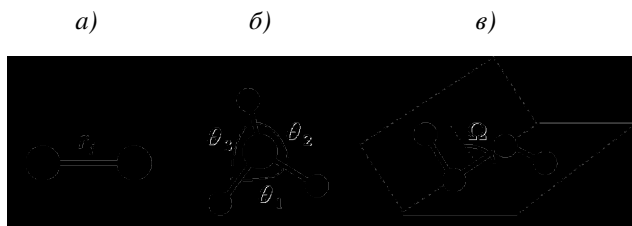
Еще в XIX веке ученые пришли к заключению, что увидеть молекулы нельзя, поскольку размеры атомов значительно меньше длины волны видимого света. А ведь знание пространственной структуры молекул позволило бы понять и спрогнозировать протекание тех или иных химических процессов, объяснить свойства исследуемого вещества или даже синтезировать новое вещество с заданными полезными свойствами.

Все же информацию о строении молекул получить можно. Для определения молекулярной структуры в кристаллической фазе вещества в настоящее время широко используются методы рентгеноструктурного анализа, нейтронного рассеяния, ядер-

ного магнитного резонанса (ЯМР) и другие. Но для молекул, состоящих из большого числа атомов и находящихся в жидкой фазе или в растворе, применим только метод ЯМР<sup>1</sup>, но и он не дает полного представления о внутримолекулярной подвижности больших молекул. Поэтому открытие лекарств, создание новых материалов – то, что всегда являлось конечной целью ученого-экспериментатора, – долгое время было возможно лишь на уровне интуиции, совмещенной с большим опытом исследователя. В настоящее время, благодаря стремительному развитию вычислительной техники, приблизиться к заветной цели позволяют *методы компьютерного моделирования*.

Во многих случаях компьютерное моделирование оказывается единственным способом получения детальных количественных сведений о поведении сложных молекулярных систем, известных в природе или, что важнее, еще только планируемых к созданию. Сопоставляя результаты вычислений с опытными данными, можно выявить наиболее важные факторы и зако-

<sup>1</sup> За развитие методов спектроскопии ЯМР для определения трехмерной структуры биологических макромолекул в 2002 году швейцарскому биофизику Курту Вютриху была вручена Нобелевская премия.



**Рисунок 1.** а) растяжение химической связи, б) изменение валентного угла, в) вращение атомных групп вокруг одинарных химических связей

$r_i$  – длина химической связи между атомами,  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  – значения валентных углов,  $\Omega$  – значение двугранного угла при вращении групп атомов вокруг химической связи.

номерности, отвечающие за те или иные свойства реальных молекул. С другой стороны, компьютерное моделирование часто выступает в качестве связующего звена между теорией и физическим экспериментом. Это особенно важно тогда, когда в теории не удастся отыскать точного аналитического решения сложных систем уравнений, описывающих поведение молекул. Наконец, компьютерное моделирование во многих случаях является мощным средством повышения информативности самих экспериментальных методов исследования молекул.



### МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Одним из «прогнозирующих» компьютерных методов является *метод молекулярной динамики (МД)*. Он широко применяется в химической физике для моделирования

структуры и динамики органических молекул: белков, жидких кристаллов, отрезков ДНК. С помощью этого метода моделируется динамическое поведение молекулярных систем, наблюдаются их свойства.



### МОДЕЛЬ

Слова «модель», «моделирование» означают, что что-то настоящее, сложное заменяется упрощенным, наглядным. В методе молекулярной динамики молекула рассматривается как *система взаи-*

*модействующих классических частиц.* Это означает, что атомы, из которых состоит молекула, считаются шариками, взаимодействующими между собой по законам классической механики.

Межатомное взаимодействие делят на валентное (ковалентное) и невалентное. *Валентное* взаимодействие возникает между атомами одной молекулы в результате обобществления валентных электронов парой соседних атомов, то есть в результате образования химической связи, и является причиной существования молекул. К таким взаимодействиям относят растяжение химической связи, изменение валентного угла, вращение атомных групп вокруг одинарных химических связей (рисунок 1). Энергия каждого из этих типов взаимодействий аппроксимируется своей формулой.

*Невалентное* взаимодействие возникает между атомами разных молекул и является причиной существования разных фаз вещества. К невалентным взаимодействиям относят Ван-дер-ваальсовы и электростатические взаимодействия атомов.

*Ван-дер-ваальсово взаимодействие* между атомами проявляется на малых расстояниях в виде отталкивания, а на больших расстояниях – в виде притяжения. Такое взаимодействие часто описывают с помощью потенциала Леннарда-Джонса:

$$U_{LJ}(r_{ij}) = \sum_{i < j} 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ,  $\sigma_{ij}$  – минимальное расстояние между атомами  $i$  и  $j$ , ближе которого атомы практически никогда не сходятся,  $\epsilon_{ij}$  – глубина потенциальной ямы (минимум энергии взаимодействия).

Этот потенциал хорошо описывает свойства систем, состоящих из одноатомных электрически нейтральных молекул. В этом случае взаимодействие между молекулами зависит лишь от расстояния между их центрами. Типичными примерами таких систем являются благородные газы. На ри-

сунке 2 представлен график потенциала Леннард-Джонса для Хе.

Электростатические взаимодействия задаются медленно убывающим кулоновским потенциалом:

$$U_{el} = \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (2)$$

где  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная, а  $q_i, q_j$  – частичные заряды на атомах, не кратные заряду электрона и возникающие из-за того, что атомы одних элементов стремятся притянуть к себе электронную пару ковалентной связи сильнее, чем атомы других элементов.

Существуют различные наборы параметров для потенциалов взаимодействий. Эти параметры зависят от типов и валентных состояний взаимодействующих атомов, их значения определяются из различных экспериментальных данных (спектральных, калориметрических, кристаллографических) и квантовохимических расчетов.



#### МЕТОД РАСЧЕТА

Основу метода молекулярной динамики составляет численное решение классических уравнений Ньютона для системы взаимодействующих частиц:

$$m_i \vec{a}_i = \vec{F}_i(\mathbf{R}), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3)$$

где  $n$  – число атомов в исследуемой молекулярной системе,  $\mathbf{R} = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n\}$  – набор координат,  $\vec{a}_i$  – ускорение  $i$ -го атома,  $m_i$  – его масса,  $\vec{F}_i$  – суммарная сила, действующая на  $i$ -ый атом со стороны остальных частиц.

Задав координаты и скорости всех частиц в начальный момент времени  $t_0$ , численно решают уравнения движения (3), вычисляя новые силы, координаты и скорости частиц в последовательные моменты времени  $t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, t_0 + 3\Delta t$  и т. д. (см. рисунок 3), где  $\Delta t$  – величина шага интегрирования в методе МД.

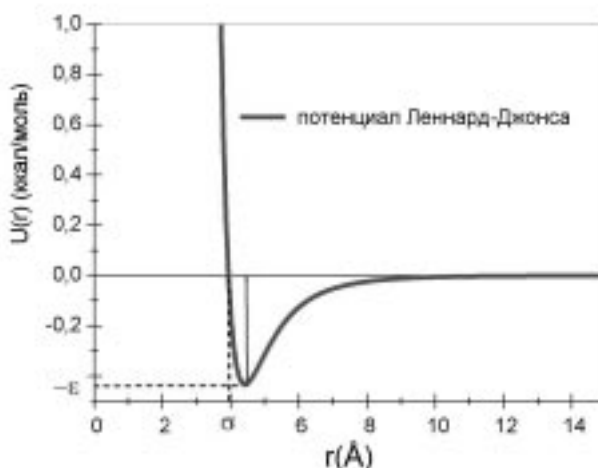


Рисунок 2. График потенциала Леннард-Джонса, описывающий взаимодействие между молекулами Хе. Параметры  $\epsilon_{ij} = 0.433$  ккал/моль,  $\sigma_{ij} = 3.935 \text{ \AA}$ .

При этом полагают, что в течение времени  $\Delta t$  сила не изменяется, то есть на каждом шаге можно использовать уравнение равноускоренного движения:

$$\begin{aligned} \vec{a}_i(t) &= \frac{\vec{F}_i(\mathbf{R}, t)}{m_i} \\ \vec{V}_i(t + \Delta t) &= \vec{V}_i(t) + \vec{a}_i(t)\Delta t \\ \vec{r}_i(t + \Delta t) &= \vec{r}_i(t) + \vec{V}_i(t)\Delta t + \frac{\vec{a}_i(t)\Delta t^2}{2} \end{aligned} \quad (4)$$

Таким образом получают траекторию системы, то есть совокупность координат  $\mathbf{R}$  и скоростей  $\mathbf{V} = \{\vec{V}_1, \vec{V}_2, \dots, \vec{V}_n\}$  всех  $n$  атомов в зависимости от времени  $t$ . Это позволяет в методах МД описывать не только равновесные свойства, но также характеризовать динамические процессы и получать информацию о кинетических коэффициентах (например, диффузии).

Как известно, полный набор координат и скоростей молекул системы в данный



Рисунок 3. Траектория атома в последовательные моменты времени  $t_0 + \Delta t, t_0 + 2\Delta t, t_0 + 3\Delta t$ .

момент времени характеризует микроскопическое состояние системы. Средние значения термодинамических свойств системы получают путем усреднения по времени соответствующей величины, зависящей от микроскопического состояния.



### МЕТОДЫ УСКОРЕНИЯ РАСЧЕТОВ МД

Время, необходимое для расчета траектории молекул, зависит от размера моделируемой системы и величины шага интегрирования. Очевидно, что, чем больше рассматриваемая система, тем точнее будут получаемые результаты, но увеличение размера системы сопровождается значительными тратами компьютерного времени, связанными с возросшим количеством рассматриваемых пар молекул.

Чем больше шаг интегрирования, тем меньше шагов потребуется проделать процессору для расчета молекулярной траектории заданной длины, но от величины шага зависит точность проделанных по формуле (4) вычислений: чем шаг больше, тем точность меньше.

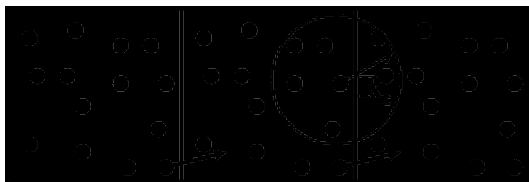
Как, не пренебрегая точностью вычислений, уменьшить затраты компьютерного времени?

Оказывается, время моделирования можно значительно сократить, используя периодические граничные условия и уменьшая число степеней свободы атомов в молекулах, то есть рассматривая так называемые жесткие модели молекул.



### ПЕРИОДИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

При современном состоянии компьютерной техники



**Рисунок 4.** Изображение ячейки моделирования и двух ее образов.

реально поддаются моделированию системы порядка нескольких сотен или тысяч молекул, что несопоставимо с числом Авогадро ( $N_A \approx 6 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>), являющимся характерным размером термодинамической системы. Тем не менее, даже с небольшим числом молекул можно исследовать свойства термодинамических систем, используя *периодические граничные условия*. Применяя эти условия, реальную бесконечную систему заменяют совокупностью одинаковых конечных систем, каждая из которых расположена в пространственной ячейке, окруженной со всех сторон тождественными ячейками (рисунок 4). Молекулы, находящиеся в одной ячейке, взаимодействуют друг с другом и молекулами в соседних ячейках. Взаимодействующими считаются молекулы, расположенные внутри сферы с радиусом  $R_c$  (радиус сферического отсечения взаимодействий), величина которого должна быть не более половины длины ребра основной ячейки. Взаимодействие с молекулами, расположенными вне этой сферы, не учитывается. Использование такой сферы отсечения взаимодействий допустимо, так как потенциал Леннарда-Джонса быстро спадает с увеличением расстояния между молекулами. Внутри сферы отсечения включаются молекулы, расположенные как в центральной ячейке, так и в соседних ячейках. Молекула, покидающая ячейку через одну из граней в ходе молекулярно-динамического расчета, попадает в другую ячейку, но при этом такая же молекула поступает в эту ячейку через противоположную грань. При этом *моделируется динамика лишь одной такой ячейки*. Естественно, что размер ячейки должен быть достаточно большим для исключения возможности краевых эффектов, – молекула не должна взаимодействовать сама с собой.



### ЖЕСТКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ

При рассмотрении методами МД систем многоатомных молекул, взаимодействие атомов в которых допускает классическое описание, следует учитывать наличие в систе-

ме различных характерных времен или частот, соответствующих внутримолекулярным и межмолекулярным движениям. Поскольку эти величины могут различаться на порядок и более, шаг интегрирования уравнений движения всех составляющих систему частиц должен соотноситься с наименьшим из характерных времен. Очевидно, что это требует значительно большего количества шагов для наблюдения за отрезком фазовой траектории требуемой длины, что существенно усложняет решение поставленной задачи. Чтобы избежать этого, обычно рассматривают более простую модель молекул, в которой не принимаются в расчет какие-либо из внутренних степеней свободы молекулы. Например, можно поддерживать постоянными длины связей в молекулах и, таким образом, абстрагироваться от внутримолекулярных высокочастотных колебаний. Для этого используют алгоритмы, корректирующие положения тех «связанных» атомов, которые в процессе моделирования разошлись на расстояние, большее, чем заданная длина связи (рисунок 5).

Благодаря такому подходу, удается увеличить шаг моделирования от 0.1 фс до 1–2 фс (1фс = 10–15 с).



### ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Время, необходимое для расчета траектории молекулы, – порядка нано (1нс = 10<sup>-9</sup> с) и микросекунд (1мкс = 10<sup>-6</sup> с). Это означает, что, для того чтобы провести моделирование, компьютеру требуется проделать миллионы шагов моделирования. А так как время, затрачиваемое процессором на 1 шаг молекулярной динамики, составляет от нескольких секунд до десятков секунд (в зависимости от размера моделируемой молекулярной системы), то, для того чтобы получить нужные результаты, нам придется ждать долгие недели и месяцы расчета!

К счастью, существует выход из этой сложной ситуации. Оказывается, время, необходимое для расчета траектории молекулярной системы, можно значительно сократить, используя параллельные про-

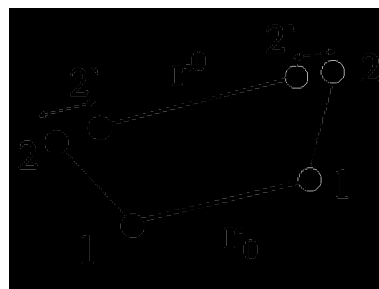


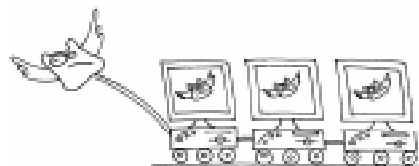
Рисунок 5. Действие алгоритма,

поддерживающего длину связи постоянной: 1 – начальное положение «связанных» атомов; 2 – их положение после выполнения смещения; 2' – после корректировки длины.

На рисунке  $r^0 = r_0 + d$ , где обычно  $d = 10^{-4} \cdot r_0$ .

граммы, запускаемые на параллельных кластерах.

### ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ КЛАСТЕР



Наш обычный персональный компьютер, за которым мы привыкли работать, представляет собой последовательную машину, – это означает, что в каждый момент времени он выполняет только одну операцию над одним элементом данных. В состав такого компьютера, как правило, входит один центральный процессор, основной задачей которого является выполнение команд, выбираемых из оперативной памяти по очереди, одна за другой (рисунок 6). Скорость работы этой машины определяется быстродействием ее центрального процессора, временем доступа к оперативной памяти и разрядностью машинного слова. В персональных компьютерах на базе



Рисунок 6. Схема последовательного компьютера.

процессора Intel Pentium разрядность машинного слова составляет 32 бита (4 байта). Для научных расчетов используются рабочие станции с разрядностью машинного слова 64 бита (8 байтов). Это компьютеры таких производителей, как Sun Microsystems, Hewlett Packard, Silicon Graphics и других.

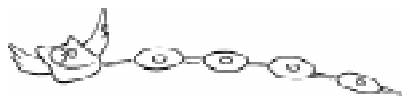
*Параллельный кластер* представляет собой совокупность таких рабочих станций, связанных достаточно быстрой аппаратурой передачи данных. В такой вычислительной системе оперативная память есть у каждого процессора. Каждый процессор имеет доступ только к своей памяти (рисунок 7).

В простейшем случае, кластер можно собрать из персональных компьютеров, соединив их быстрой сетью (например, Ethernet 100Мб), но машины должны работать под управлением ОС Linux.

При работе на кластере пользователь имеет возможность запускать параллельную программу на нескольких компьютерах сразу. И если считать, что все процессоры в кластере одинаковые, то можно ожидать, что программа будет выполняться во столько раз быстрее, сколько компьютеров будут производить вычисления. Результаты, полученные на одних компьютерах, в определенные моменты времени должны передаваться на другие для дальнейшей работы. Взаимодействие между компьютерами реализуется с помощью обмена сообщениями, которые передаются аппаратурой передачи данных. Поэтому результирующее быстродействие в этом случае определяется не толь-

ко быстродействием процессоров и их временем доступа к оперативной памяти, но и, что очень важно, скоростью работы аппаратуры передачи данных.

### ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ ПРОГРАММЫ



Что же представляет собой параллельная программа и в чем ее отличие от обычной, последовательной?

В последовательной программе элементы массива, например, обрабатываются один за другим. Процессор не может приступить к обработке следующего элемента, пока полностью не завершит вычисления с текущим элементом. Параллельная программа выполняется на нескольких процессорах одновременно, поэтому различные фрагменты массива обрабатываются на разных процессорах параллельного кластера, процессоры исполняют разные копии одинаковой программы в качестве отдельных задач, то есть процессов. Распределение данных сводится к описанию в программе локального массива данных, представляющего собой часть общего массива, и к дальнейшему оперированию в каждом процессе только с элементами «своего» подмассива и к пересылке между процессами недостающих для дальнейшего счета элементов «чужих» подмассивов. Такой подход называют *параллелизмом данных*.

При написании параллельной программы программисту приходится решать две очень важные проблемы. Первая – это *обеспечение равномерной загрузки всех доступных процессоров*. Ведь если основная вычислительная работа будет ложиться на один из процессоров, а остальные процессоры в это время будут простаивать, то ни-

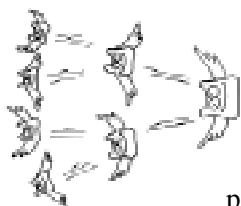


Рисунок 7. Схема кластера.

какого выигрыша за счет распараллеливания задачи не будет, мы просто придем к случаю обычных последовательных вычислений.

Вторая и не менее важная проблема, с которой сталкивается программист, – *организация обмена данными между процессорами*. Если скорость обмена данными низкая, а количество данных для пересылки велико, то основная часть времени будет тратиться впустую на ожидание информации, необходимой для дальнейшей работы данного процессора. Поэтому разработчик программы должен всегда стараться сделать минимальным объем данных, предназначенных для обмена.

### ПАРАЛЛЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

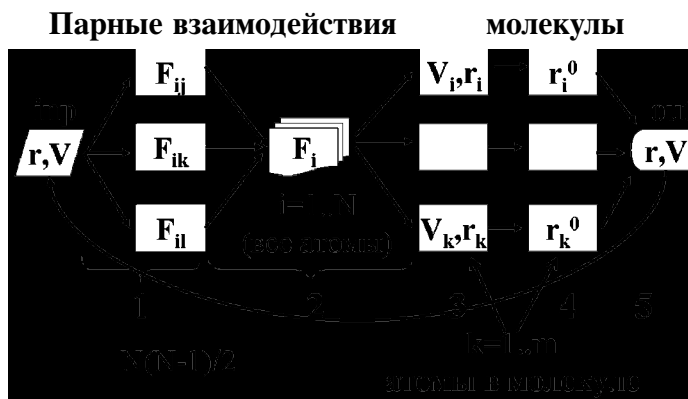


Для того чтобы разработать параллельный алгоритм, сначала необходимо проанализировать исходную задачу и оценить возможность ее распараллеливания.

Вспомним, что на каждом шаге молекулярной динамики компьютер должен выполнить следующие операции:

- 1) используя известные координаты частиц, вычислить силы, действующие на каждую частицу со стороны всех остальных частиц;
- 2) вычислить новые координаты и скорости атомов;
- 3) скорректировать новые положения атомов в пространстве, если мы используем алгоритм, поддерживающий длины связей постоянными.

Наиболее трудоемкая операция на каждом шаге – *вычисление сил*. Она требует числа операций, квадратичного по отношению к числу частиц. Но силы, действующие на каждый атом, могут быть вычисле-



**Рисунок 8.** Параллельный алгоритм одного шага моделирования МД. Inp – входные данные – координаты и скорости всех атомов системы, out – данные, получившиеся в результате выполнения одного шага МД, они используются как входные на следующем шаге.

ны независимо, на разных процессорах, поэтому данная задача хорошо подходит для распараллеливания.

Возможный параллельный алгоритм моделирования одного шага молекулярной динамики в целом состоит из пяти этапов и использует два различных принципа распараллеливания: по силам (то есть по парам взаимодействующих атомов, независимо от принадлежности их разным молекулам) и по молекулам (то есть по группам химически связанных атомов) (рисунок 8).

На первом этапе происходит передача координат всех атомов из главного процесса всем остальным процессам и параллельное вычисление сил, действующих на каждый атом со стороны других атомов системы; распараллеливание работы процессоров на этом этапе происходит по парам взаимодействующих атомов, независимо от принадлежности их разным молекулам. На следующем этапе выполняется передача вычисленных сил главному процессу, суммирование этих сил и передача частей результирующего массива разным процессорам. Третий и четвертый этапы – этапы перемещения атомов – используют принцип распараллеливания работы процессоров по молекулам. На третьем этапе вычисляются новые скорости и



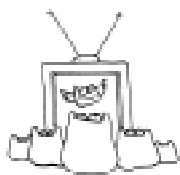
координаты атомов. На четвертом этапе выполняется параллельная коррекция длины химических связей для всех химически связанных атомов. И, наконец, на пятом этапе происходит передача новых координат атомов главному процессу.

Заметим, что распараллеливание работы процессоров по парам взаимодействующих атомов на первом этапе позволяет обеспечить равномерную загрузку всех процессоров.

А благодаря тому, что распараллеливание на третьем и четвертом этапах происходит по молекулам, удается избежать использования больших объемов данных для передачи между процессорами. Ведь на этапе параллельной коррекции длины химических связей каждому процессору требуются координаты атомов только тех молекул, для длин связей которых производится коррекция.

Таким образом, основные задачи, возникающие при разработке эффективной параллельной программы, – равномерная и сбалансированная загрузка всех процессоров и минимизация обмена данными между ними – успешно решаются в данном алгоритме распараллеливания. Благодаря этому, запуск такой программы на параллельном кластере существенно уменьшает время, необходимое для моделирования.

Используя параллельные программы молекулярной динамики, можно моделировать системы, состоящие из большого числа многоатомных молекул.



### МОЛЕКУЛЯРНОЕ КИНО

Помимо МД существуют, конечно, и другие программы моделирования молекулярных систем. Но *метод МД* – единственный метод, позволяющий наблюдать динамику молекул.

Зная траектории атомов, полученные в процессе моделирования, и используя различные программы графической визуализации (см., например, <http://www.umass.edu/microbio/rasmol> или другие), можно делать

мультфильмы, демонстрирующие движение молекул в системе.

В мультфильме *Life\_of\_molecules.avi* Вы можете наблюдать систему, состоящую из 762 молекул жидкого кристалла и 6 молекул хиральных добавок в кубической ячейке.

Сегодня трудно встретить человека, который бы не пользовался удивительными свойствами жидких кристаллов. ЖК-индикаторы являются основой современных калькуляторов, портативных компьютеров «Notebooks», миниатюрных плоских экранов телевизоров, словарей-переводчиков, пейджеров и многих других современных электронных технических и бытовых приборов и устройств. Между тем, знание о жидких кристаллах и их известность в широких кругах явно недостаточны.

Что же это за вещества с таким парадоксальным названием «жидкие кристаллы» и почему к ним проявляется столь значительный интерес?

С физической точки зрения, *жидкий кристалл* – самостоятельное фазовое состояние, не менее важное и интересное, чем всем хорошо известные фазы вещества: твердая, жидкая и газообразная. Находясь в таком состоянии, вещество проявляет одновременно свойства кристалла и жидкости. Жидкокристаллическое состояние осуществляется при плавлении кристаллов некоторых веществ и существует в интервале от температуры плавления кристалла до некоторой более высокой температуры, при нагреве до которой жидкий кристалл переходит в обычную жидкость. Такие жидкие кристаллы называют термотропными.

Далеко не все вещества могут находиться в жидкокристаллическом состоянии. Главное требование к претендентам – резкая анизотропия формы; протяженность молекул жидкого кристалла в одном направлении, как правило, в 2–3 раза больше, чем в поперечном. Сложные полимеры «предпочитают» скручиваться в клубки. Поэтому молекулы жидких кристаллов обычно содержат элементы, препятствующие скручиванию, – бензолные кольца (рисунок 9).

Подобно обычной жидкости, жидкий кристалл обладает текучестью и принимает



форму сосуда, в который он помещен. Этим он отличается от известных всем кри-



сталлов. Однако, несмотря на это свойство, объединяющее его с жидкостью, он обладает свойством, характерным для кристаллов. Это – упорядочение в пространстве молекул, образующих кристалл. Правда, это упорядочение не такое полное, как в обычных кристаллах: у жидких кристаллов нет жесткой кристаллической решетки, а есть лишь частичный порядок в пространственной ориентации молекул. Такой порядок в ориентации может проявляться, например, в том, что все длинные оси молекул в жидкокристаллическом образце ориентированы одинаково.

Одно из самых важных свойств жидких кристаллов (именно оно используется в ЖК-дисплеях) – возможность изменять свою ориентацию в пространстве в зависимости от прикладываемого электрического поля. Благодаря такому свойству, ячейки жидкокристаллических мониторов способны под напряжением изменять количество пропускаемого света.

Те, кому приходилось работать с жидкокристаллическими мониторами, наверняка замечали, что при резкой смене картинки на экране иногда остаются так называемые «призраки», послесвечение. Это объясняется тем, что для поворота кристаллов, происходящего при изменении прикладываемого напряжения, необходимо некоторое время. В настоящее время активно исследуются возможности для устранения этого недостатка и сокращения времени реакции. В связи с этим большое внимание уделяется изучению смесей жидких кристаллов с другими веществами, способными менять их структуру или свойства. К таким веществам относятся, например, хиральные добавки (от греч. *cheir* – рука) (рисунок 10). Это обыкновенные кристаллические вещества, но они обладают так называемой закручивающей способностью и при растворении в жидкокристаллических растворителях даже в очень небольшом процентном

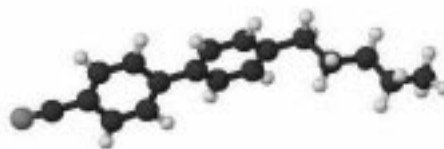


Рисунок 9. Молекула жидкого кристалла.

соотношении (1–3 весовых %) индуцируют изменение ориентации молекул.

Метод молекулярной динамики позволяет исследовать такие растворы. Конечно, размеры ячейки моделирования (порядка нескольких десятков ангстрем) и время полного моделирования (порядка нескольких наносекунд) не могут сравниться с размерами ячейки ЖК монитора (несколько десятков микрометров) и временем изменения ориентации молекул жидкого кристалла (несколько миллисекунд). Такие исследования носят чисто фундаментальный характер. Тем не менее, компьютерное моделирование позволяет делать множество полезных выводов, например, почему такое маленькое количество молекул хиральной добавки может существенно менять ориентацию и свойства жидких кристаллов, как проявляется взаимное влияние хиральных добавок и жидкокристаллического окружения друг на друга и другие.

Но вернемся к мультфильму.

Сначала мы можем видеть только огромное количество взаимодействующих атомов. В нашей ячейке моделирования их около 29 тысяч. Если присмотреться, то можно заметить, что все длинные оси молекул в ячейке ориентированы прибли-

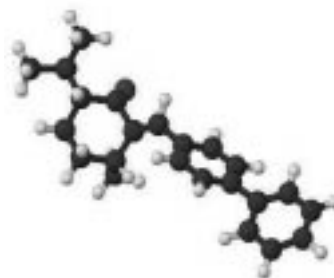


Рисунок 10. Молекула хиральной добавки.

тельно одинаково, в соответствии с обязательным свойством жидкого кристалла. Для того чтобы увидеть молекулы добавок, растворенных в жидком кристалле, необходимо проникнуть «внутри» системы, для чего мы постепенно делаем молекулы жидкого кристалла невидимыми, «удаляем» их. Наконец, можно увидеть 6 растворенных молекул и выбрать одну из них для ближайшего рассмотрения. Теперь у Вас уникальная возможность проследить за поведением одной из молекул!



### РЕАЛЬНОСТЬ

...вопрос только в том, насколько реальны ее движения,

насколько реальна рассматриваемая нами модель? Возможно, правильный ответ на этот вопрос состоит в следующем. Реально все ровно настолько, насколько результаты, полученные из моделирования, соответствуют экспериментальным данным. Только в случае совпадения этих данных можно предположить, что используемая нами модель в какой-то мере отражает действительность.

А вообще, нужно помнить, что результаты компьютерного моделирования – это всегда гипотеза, предположение. Но не просто интуитивная догадка, а предположение, сформированное компьютером на основе заданных исходных моделей и их параметров.

### Литература

1. Метод молекулярной динамики в физической химии. М.: Наука, 1996.
2. Немнюгин С., Стесик О. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. СПб.: «БХВ-Петербург», 2002.
3. Беляков В.А. Жидкие кристаллы. М., 1986.
4. Komolkin A.V., Laaksonen A., Maliniak A. Molecular dynamics simulation of nematic liquid crystal // J. Chemical Physics, 1994, 101(5). P. 4103–4116.
5. Бродская Е.Н., Пиотровская Е.М. Метод молекулярной динамики в физической и коллоидной химии. СПб., 1999.
6. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.

*Комолкин Андрей Владимирович,  
кандидат физ.-мат. наук,  
доцент кафедры квантовых  
магнитных явлений физического  
факультета Санкт-Петербургского  
государственного университета.*

*Эльц Екатерина Эдуардовна,  
студентка 2-го курса магистратуры  
кафедры вычислительной физики  
физического факультета Санкт-  
Петербургского государственного  
университета.*



Наши авторы, 2004.  
Our authors, 2004.