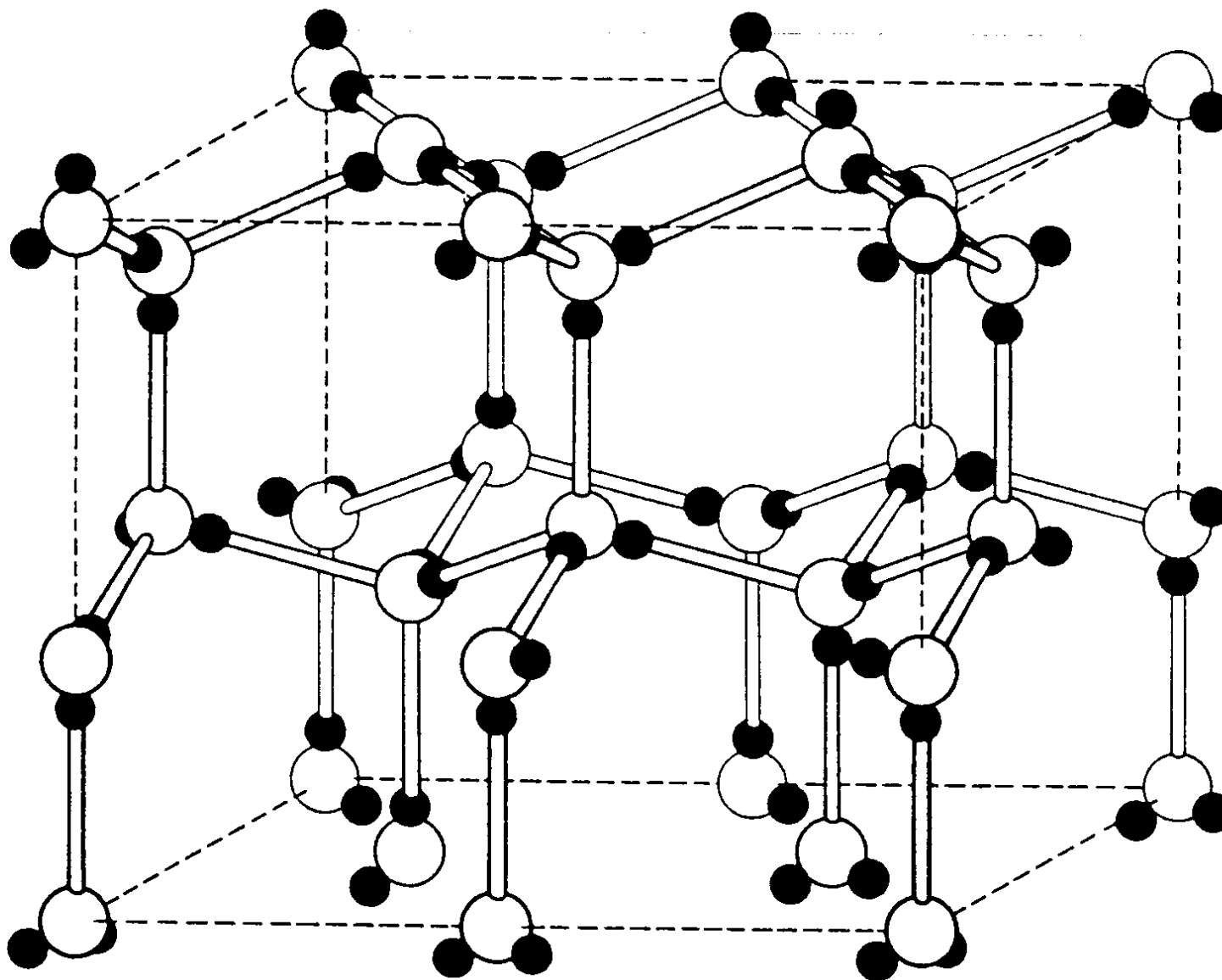


# Поиск периодических конформаций полиакриат-иона, вложимых в гидратный каркас.

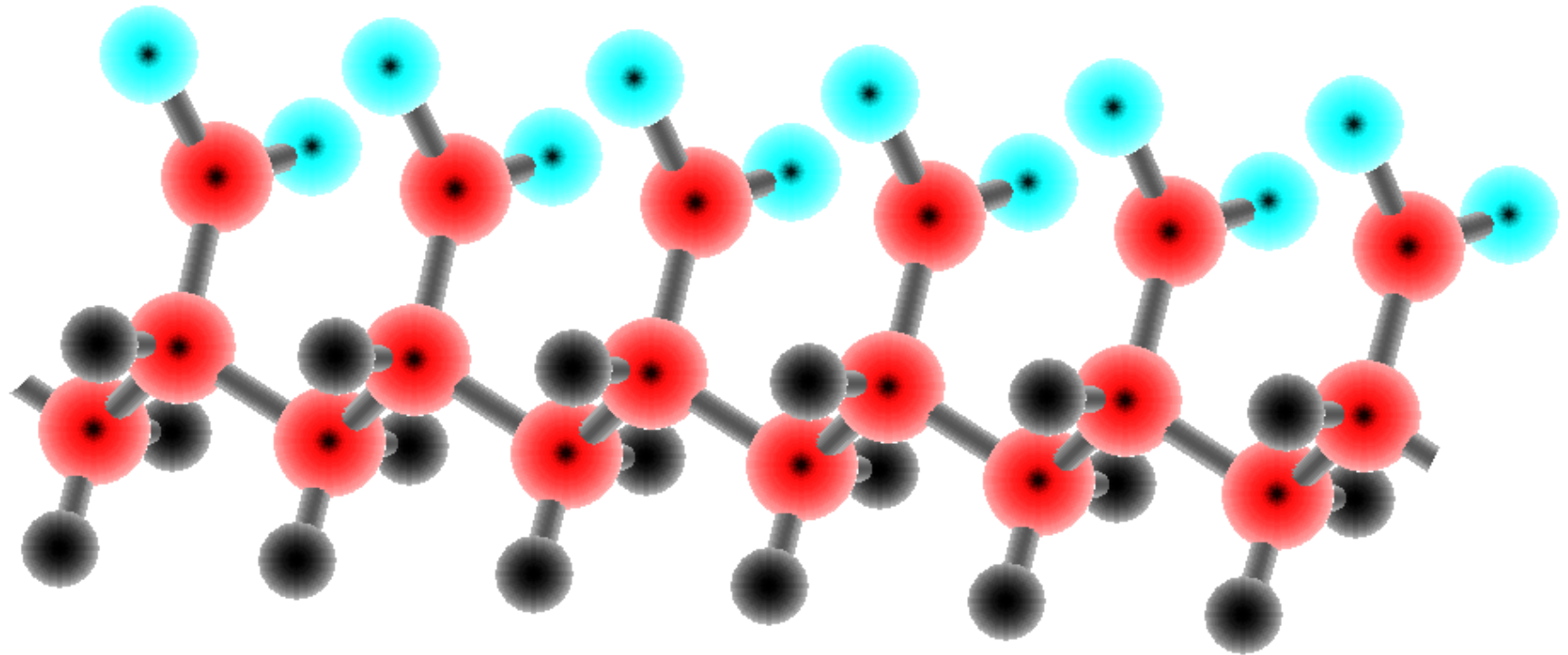
Сафин Альберт, 4 курс ФИТ НГУ

Научный руководитель – Киреев С. Е.

# Кристаллическая структура воды



# Анион полиакриловой кислоты

$$-CH_2 - CH(COO^-) -$$


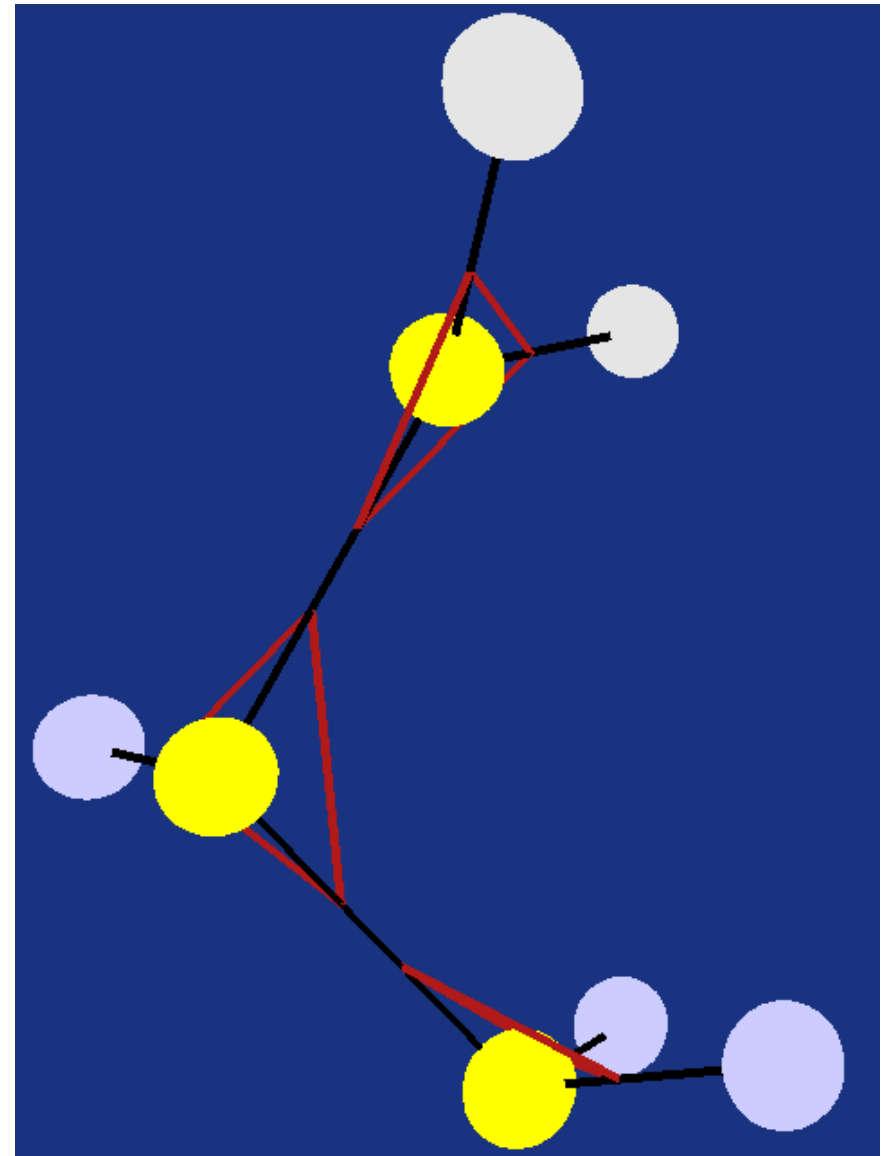
# Модель

Ограничения:

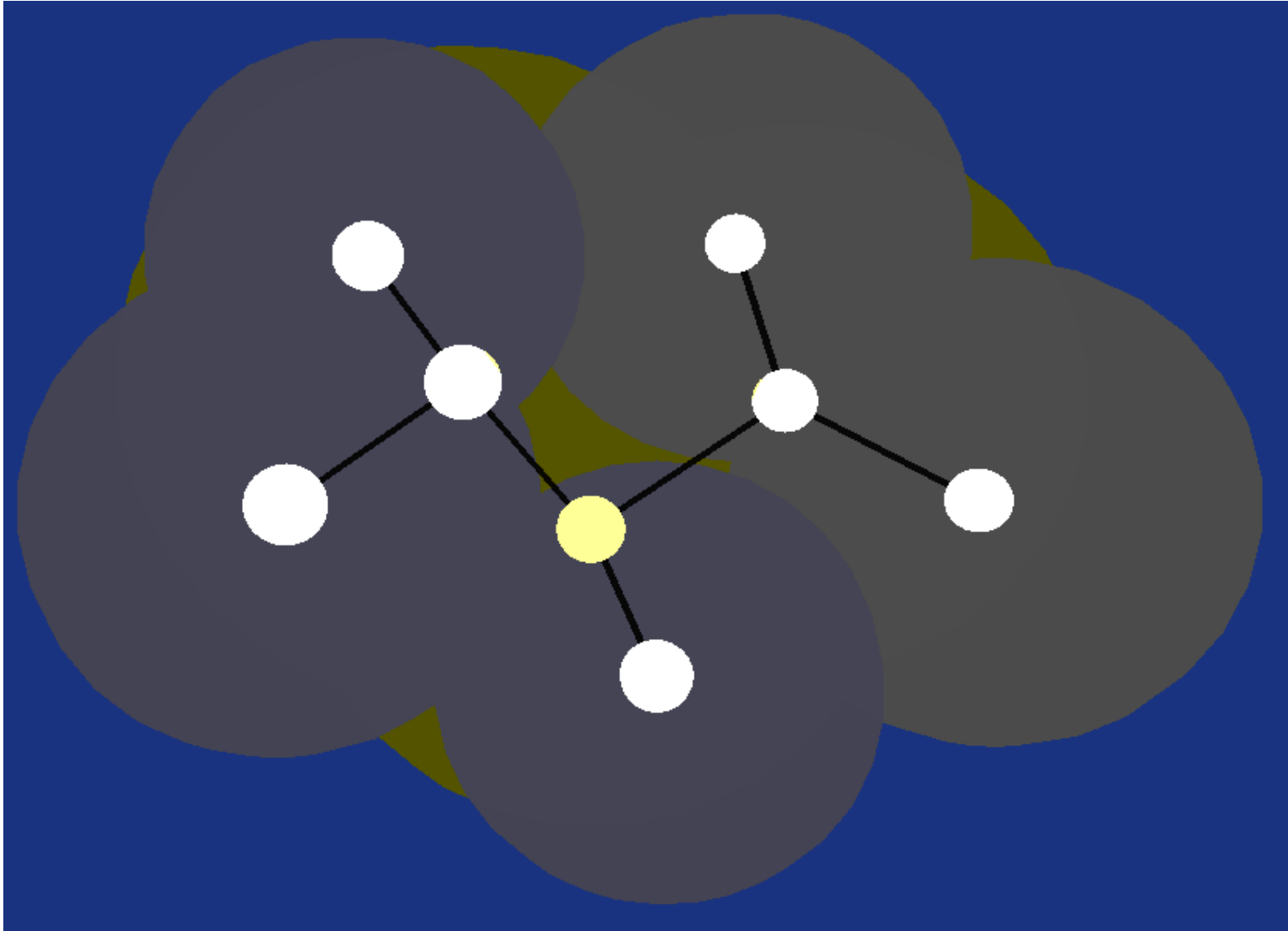
- Валентные расстояния
- Валентные углы
- Ван-дер-ваальсовы радиусы
- Цепь должна встраиваться в кристаллическую структуру воды.

Степени свободы:

- Вращение относительно связей между атомами углерода
- Зеркальное отражение мономера



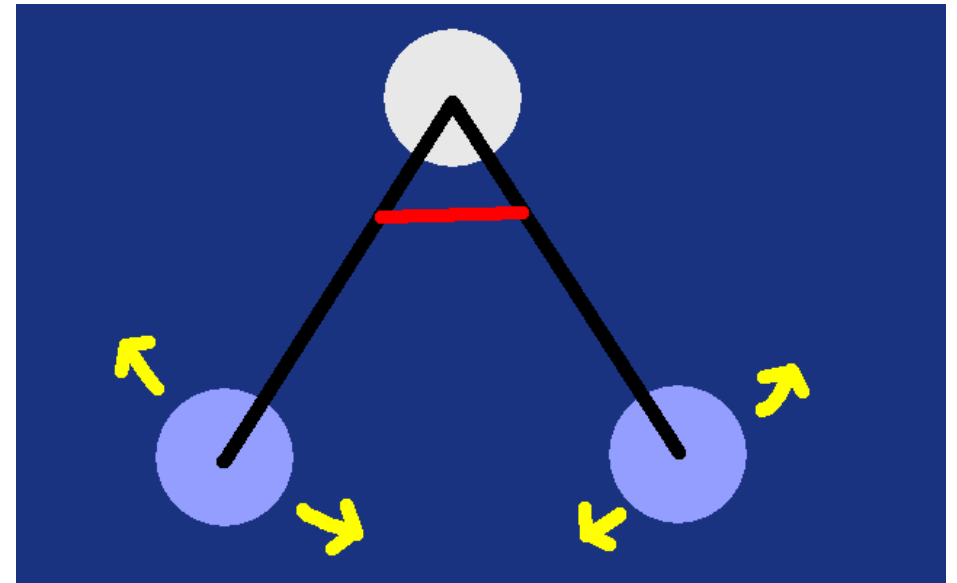
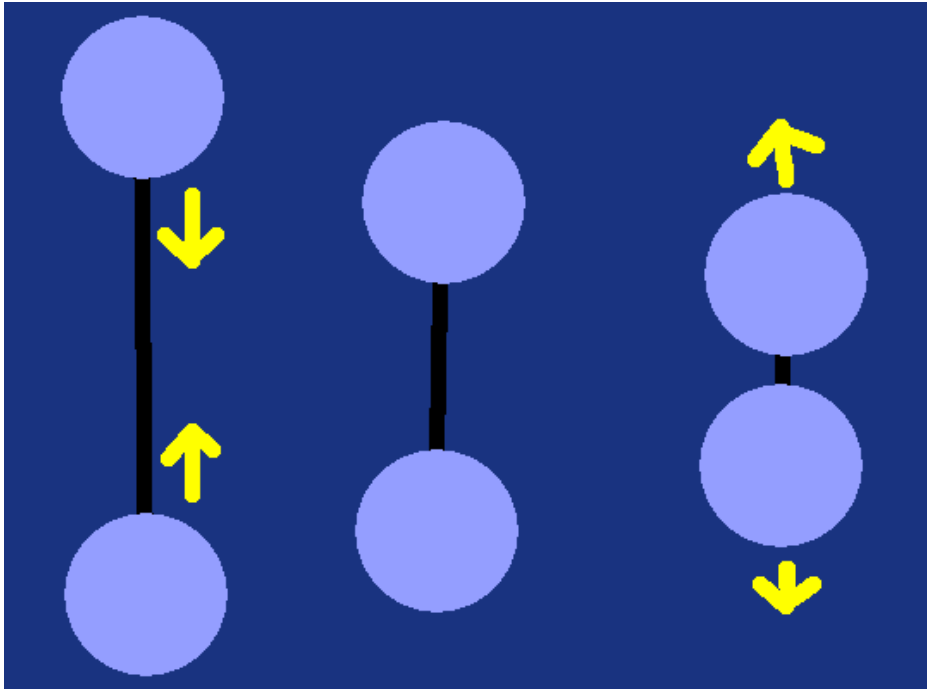
# Ван-дер-ваальсовы радиусы



# Постановка задачи

Поиск цепочек полимера, соответствующих ограничениям.

# Подход к решению силовой способ



# Результаты

- Изучена модель гидрата полиакрилат-иона
- Построен алгоритм нахождения вложения цепочки в гидратный каркас
- Алгоритм реализован в виде графической программы



# Дальнейшие планы

- Калибровка сил
- Автоматическое распутывание цепочки
- Жесткие шарниры
- Скорость работы