

Институт биологии Карельского научного центра РАН  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова



**XV Симпозиум  
Петрозаводск**

**XV Симпозиум  
по межмолекулярному взаимодействию  
и конформациям молекул**

14–18 июня 2010 года,  
Петрозаводск

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

Институт биологии Карельского научного центра РАН  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

---

**XV Симпозиум  
по межмолекулярному взаимодействию  
и конформациям молекул**

**14–18 июня 2010 года,  
Петрозаводск**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

## Оглавление

Предисловие	13
Глава 1. Методы квантовой и молекулярной механики в моделировании механизмов реакций ферментативного катализа <i>А.В. Немухин, С.В. Луцкекина, С.Д. Варфоломеев</i>	17
Глава 2. Компьютерное моделирование молекулярной динамики <i>Н.К. Балабаев, К.В. Шайтан</i>	35
Глава 3. Обзор методов компьютерного моделирования молекулярных систем: метод Монте-Карло <i>А.Л. Рабинович, В.А. Иванов</i>	63
Глава 4. Методы Монте-Карло в обобщенных ансамблях для моделирования полимеров <i>П.Н. Воронцов-Вельяминов, Н.А. Волков, А.А. Юрченко, А.П. Любарцев</i>	121
Глава 5. Мультимасштабное моделирование и обратный метод Монте-Карло <i>А.П. Любарцев</i>	175
Глава 6. Гибридная самосогласованная схема MC/RISM для компьютерного моделирования полимерных систем <i>П.Г. Халатур</i>	193
Глава 7. Компьютерное моделирование фазового равновесия в растворах жесткоцепных полимеров <i>В.А. Иванов, Ю.А. Мартымянова, М.Р. Стукан</i>	275
Глава 8. Конструирование последовательностей макромолекул <i>А.В. Чертович, А.Р. Хохлов</i>	317
Глава 9. Инверсия заряда дендримера в комплексах с линейными полиэлектролитами <i>С.В. Люлин, А.В. Люлин, А.А. Даринский</i>	339
Глава 10. Атомистическое моделирование деформированных полимерных стекол: временные масштабы и механизмы релаксации <i>А.В. Люлин, М.А.Й. Михелс</i>	357
Глава 11. Молекулярно-динамическое моделирование термомеханического поведения слоистых нанокристаллов <i>М.А. Мазо</i>	371
Глава 12. Цепные молекулы как компоненты мембранных систем: компьютерное моделирование <i>А.Л. Рабинович</i>	409
Глава 13. Молекулярно-динамическое моделирование ненасыщенных фосфолипидных бислоев с высоким содержанием холестерина	455

*В.В. Корнилов, А.Л. Рабинович, Н.К. Балабаев*

Глава 14. Молекулярная динамика и диффузия в биомембранах  
с различным липидным составом 491

*К.В. Шайтан, М.Ю. Антонов, Е.В. Турлей, О.В. Левцова, К.Б. Терешкина,  
И.Н. Николаев*

Глава 15. Молекулярный дизайн наноконтейнеров на основе углеродных  
нанотрубок 505

*К.В. Шайтан, Е.В. Турлей, Д.Н. Голик, И.Н. Николаев*

Глава 16. Моделирование деформирования полимеров на основе определяющих  
соотношений механики сплошных сред 519

*С.А. Тиман, М.Ю. Шамаев, В.Г. Ошмян*

Глава 17. Моделирование больших молекулярных агрегатов  
с использованием параллельных вычислений методом Монте-Карло 553

*А.В. Теплухин*

Глава 18. Возможности предсказания свойств линейных и сетчатых полимеров  
и компьютерного синтеза полимеров с заданными свойствами 571

*А.А. Аскадский*

Глава 19. Солитонные возбуждения в полимерных системах 589

*А.В. Савин*

Авторы сборника и лекторы конференции

Предметный указатель