

странстве, в том числе и завязываясь в узлы. Наличие цепной структуры порождает целый ряд особенностей физического поведения макромолекулярных систем: так называемую *линейную память* (т.е. строго установленное положение каждого мономера вдоль цепи); ограничения на независимое перемещение мономеров благодаря наличию химических связей; большие пространственные флуктуации (т.е. даже отдельная макромолекула может рассматриваться как статистическая система с большим количеством степеней свободы). (Подробнее о физике полимеров можно прочитать в книжке [2].)

Наличие линейной памяти ведет к тому, что различные части полимерной молекулы, флуктуирующие в пространстве, не могут «проходить сквозь друг друга» непрерывным образом (без разрыва цепи). Для системы кольцевых цепей это означает, что топологически доступными друг для друга являются лишь те конфигурации, которые могут быть совмещены друг с другом с помощью непрерывного преобразования (рис.1).

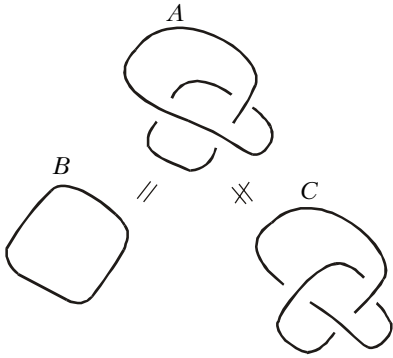


Рис.1. Непрерывной деформацией нити узел А можно совместить с узлом В, но нельзя совместить с узлом С

Очень часто полимеры моделируют траекториями случайного блуждания, при котором каждый следующий шаг случаен и совершенно независим от всех предыдущих. Такое движение часто также называют броуновским – в честь биолога Броуна, впервые наблюдавшего хаотическое движение микроскопических частичек цветочной пыльцы в жидкости. Наглядное представление о движении броуновских частиц дает игра в жмурки: водящий, у которого завязаны глаза, – это частица пыльцы, а приятели водящего, которых он хо-

чет догнать, играют роль случайных сил, действующих со стороны среды на частицу. Если допустить, что водящий каждый шаг делает в случайном направлении, нетрудно оценить, как далеко в среднем водящий отойдет от исходной точки за N шагов.

Пусть \vec{R}_N – вектор перемещения водящего за N шагов и пусть он делает шаги $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_N$ равной длины a случайно в любом из направлений на юг, север, запад, восток (без предпочтения какого-либо направления). Представим \vec{R}_N (считая $\vec{R}_0 = 0$) в виде

$$\vec{R}_N = \overbrace{(\vec{R}_N - \vec{R}_{N-1})}^{\vec{a}_N} + \overbrace{(\vec{R}_{N-1} - \vec{R}_{N-2})}^{\vec{a}_{N-1}} + \dots + \overbrace{(\vec{R}_2 - \vec{R}_1)}^{\vec{a}_2} + \overbrace{(\vec{R}_1 - \vec{R}_0)}^{\vec{a}_1}.$$

Возводя в квадрат, получим

$$\vec{R}_N^2 = \vec{a}_N^2 + \vec{a}_{N-1}^2 + \dots + \vec{a}_1^2 + 2 \times$$

$$\times (\text{все члены вида } \vec{a}_j \vec{a}_k \text{ с } j \neq k).$$

Учитывая, что $a_j = a$, а значение всех перекрестных членов в среднем равно нулю, получаем, что водящий удалится от начальной точки за N шагов в среднем на расстояние

$$R_N \equiv \sqrt{R_N^2} = a\sqrt{N}.$$

Нетрудно прикинуть, сколько это: считая длину шага равной примерно одному метру, а число сделанных шагов равным, скажем, 100, получается, что расстояние по прямой между начальной и конечной точками в среднем составит всего $a\sqrt{N} = 10$ м, в то время как общая длина пройденного пути $aN = 100$ м.

Теперь мы можем оценить вероятность P_N того, что после N случайных шагов водящий окажется на расстоянии не более одного шага от той точки, откуда начал двигаться. Считая (очень грубо), что в пределах круга радиусом $R_N = a\sqrt{N}$ можно с равной вероятностью оказаться в любой точке (в том числе и в той, откуда вышел), вероятность P_N оценим как $P_N \approx a^2/S$, где $S = \pi R_N^2 = \pi a^2 N$ – площадь круга радиусом R_N . Для приведенных

выше значений $a = 1$ м и $N = 100$ получаем $P_N \approx 1/314$. Этот ответ надо понимать так: если играть в жмурки каждый день в течение 314 дней (т.е. около 10 месяцев) и водящий будет в каждой игре делать 100 шагов, то примерно 1 раз за все это время он *случайно* на последнем шаге окажется вблизи той точки, в которой он начал водить. Мало это или много? Все зависит от того, что с чем сравнивать...

Итак, возвращаясь от игры в жмурки к случайным блужданиям, нетрудно понять, что приведенные вычисления для P_N дают оценку вероятности того, что случайное блуждание из N шагов с длиной шага a , без учета каких-либо топологических взаимодействий, на плоскости образует замкнутую петлю (кольцо). Если случайное блуждание может располагаться во всем трехмерном пространстве, вероятность образования кольца после N шагов есть $P_N \approx a^3/V$, где $V = 4\pi R_N^3/3 = 4\pi(a\sqrt{N})^3/3$ – объем шара радиусом R_N .

Теперь мы подготовлены к тому, чтобы попытаться ответить на набравший вопрос: почему моток веревок, если его трясти и дергать концы веревок случайно в произвольные стороны, с гораздо большей вероятностью запутается, чем распутается?

Воспользуемся вновь геометрически наглядной аналогией с игрой в жмурки, но пусть теперь игра происходит в густом лесу и играющие бегают между деревьями. (*Предупреждение:* автор статьи не несет ответственности за последствия столкновений игроков с деревьями.) Нас будет интересовать вероятность того, что водящий после N шагов вернется в исходную точку *при условии, что траектория, по которой он двигался между деревьями, не зацепилась ни за одно дерево*. Уточним, что следует понимать под «незацепленными» за деревья траекториями. Если вдоль пути водящего (с момента выхода из начальной точки до момента возвращения в нее же) положить натянутую резиновую нить, то незацепленным за деревья траекториям отвечают такие конфигурации резинки, которые можно непрерывной деформацией (т.е. не разрывая нити) стянуть в точку (рис.2). Если этого сделать нельзя, то соответству-