

STRESZCZENIE

Przedstawiono metodę obliczeń prawdopodobieństw mikromodyfikacji łańcucha za pomocą algorytmów Verdiera-Stockmayera stowarzyszoną z metodą Metropolis – Monte Carlo. Znaleziono zależności pomiędzy tymi prawdopodobieństwami a efektywną liczbą koordynacyjną, wymuszoną odległością pomiędzy końcami łańcucha oraz entropią konformacyjną. Uzyskane zależności pozwoliły na sformułowanie nowej metody obliczania entropii konformacyjnej. Opracowaną metodę wykorzystano do obliczeń entropii konformacyjnej i energii swobodnej Helmholtza łańcucha swobodnego oraz poddanego naprężeniom pod wpływem sił zewnętrznych zanurzonego w różnych rozpuszczalnikach oraz w obecności i nieobecności ograniczeń przestrzennych. Porównanie wyników opracowanej metody z wynikami uzyskanymi metodą expanded ensemble Monte Carlo wskazuje na jej poprawność. Wykazano skuteczność opracowanej metody do obliczania entropii konformacyjnej łańcucha w wybranych układach.