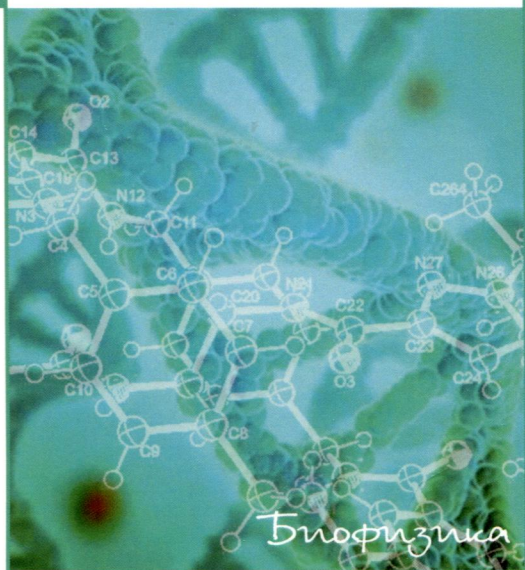


НАУЧНАЯ МЫСЛЬ



В.В. Костюков

МОЛЕКУЛЯРНАЯ МЕХАНИКА БИОПОЛИМЕРОВ



СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

НАУЧНАЯ МЫСЛЬ

СЕРИЯ ОСНОВАНА В 2008 ГОДУ



СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

В.В. КОСТЮКОВ

МОЛЕКУЛЯРНАЯ МЕХАНИКА БИОПОЛИМЕРОВ

МОНОГРАФИЯ

Электронно-

Библиотечная

znanium.com

Москва
ИНФРА-М
2020

УДК 577.32(075.4)

ББК 28.071

К72

Рецензенты:

Барановский С.Ф., доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики Севастопольского государственного университета;

Мозолева Т.В., кандидат технических наук, профессор кафедры физики и общетехнических дисциплин Черноморского высшего военно-морского училища имени П.С. Нахимова

Костюков В.В.

К72 Молекулярная механика биополимеров : монография / В.В. Костюков. — Москва : ИНФРА-М, 2020. — 140 с. — (Научная мысль). — DOI 10.12737/1010677.

ISBN 978-5-16-014913-4 (print)

ISBN 978-5-16-107409-1 (online)

Монография посвящена моделированию молекулярной механики биологически значимых полимеров – белков и нуклеиновых кислот. Показано, что алгоритмы, основанные на классических законах движения Ньютона, при качественной параметризации и достаточных вычислительных ресурсах способны корректно воспроизводить и предсказывать структуру и динамику макромолекул в водном растворе. Кратко изложены путь развития молекулярной механики биополимеров, ее теоретические основы, современное состояние и перспективы дальнейшего прогресса.

Может быть полезна научным работникам, специализирующимся в области молекулярной биофизики и молекулярной биологии, а также студентам старших курсов высших учебных заведений, обучающимся по биофизическим и смежным направлениям подготовки.

УДК 577.32(075.4)

ББК 28.071

ISBN 978-5-16-014913-4 (print)

ISBN 978-5-16-107409-1 (online)

© Костюков В.В., 2020

Оглавление

Список условных обозначений	3
Введение	4
Глава 1. ТЕОРИЯ СИЛОВОГО ПОЛЯ	6
1.1. Понятие силового поля.....	6
1.2. Потенциальные функции	7
1.3. Типы атомов	8
1.4. Валентные связи.....	11
1.5. Валентные углы.....	13
1.6. Торсионные углы	15
1.7. Ван-дер-ваальсовские взаимодействия.....	18
1.8. Электростатика	21
1.8.1. Аддитивная (неполяризуемая) модель.....	21
1.8.2. Неаддитивная (поляризуемая) модель.....	22
1.9. Ограничение дальности невалентных взаимодействий.....	30
1.9.1. Усечение	30
1.9.2. Метод Эвалда.....	32
1.10. Периодические граничные условия.....	34
Глава 2. ОСНОВНЫЕ СИЛОВЫЕ ПОЛЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОПОЛИМЕРОВ	37
2.1. CHARMM	37
2.2. AMBER	40
2.3. OPLS.....	41
2.4. GROMOS.....	43
2.5. AMOEBA	44
Глава 3. МИНИМИЗАЦИЯ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ	47
3.1. Метод наискорейшего спуска.....	49
3.2. Метод Ньютона – Рафсона.....	49
3.3. Метод сопряженных градиентов	50
3.4. Критерии сходимости.....	51
Глава 4. МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА	53
4.1. Возникновение метода молекулярной динамики	53
4.2. Интеграторы.....	58
4.2.1. Алгоритм Верле.....	59
4.2.2. Алгоритм «прыжков лягушки».....	61
4.2.3. Скоростной алгоритм Верле.....	62
4.3. Запуск процедуры молекулярной динамики	63

4.4.	Термостаты.....	66
4.4.1.	Термостат Берендсена.....	66
4.4.2.	Термостат масштабирования скоростей.....	70
4.4.3.	Коллизионный термостат Андерсена.....	70
4.4.4.	Термостат Ноэ – Гувера.....	71
4.5.	Баростаты.....	72
4.5.1.	Алгоритм Берендсена.....	72
4.5.2.	Баростат Парринелло – Рамана.....	74
4.6.	Ограничение движения атомов.....	75
4.6.1.	Алгоритм SHAKE.....	76
4.6.2.	Алгоритм RATTLE.....	79
4.6.3.	Алгоритм SETTLE.....	80
Глава 5. СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА		81
5.1.	Уравнения Ланжевена.....	81
5.2.	Броуновская динамика.....	83
Глава 6. МЕТОДЫ МОНТЕ-КАРЛО		88
6.1.	Краткие сведения из статистической термодинамики.....	88
6.2.	Алгоритм Метрополиса.....	91
6.3.	Стандартный метод Монте-Карло.....	92
6.4.	Метод конфигурационного предпочтения.....	93
6.5.	Гибридный метод.....	94
6.6.	Параллельный метод.....	95
6.7.	Метод плотности состояний.....	96
Глава 7. МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ.....		98
7.1.	Возмущение свободной энергии.....	99
7.2.	Термодинамическое интегрирование.....	103
7.3.	«Медленный рост».....	103
Глава 8. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДНОГО ОКРУЖЕНИЯ БИОПОЛИМЕРОВ ...		105
8.1.	Трехцентровые модели.....	107
8.1.1.	Модель SPC.....	108
8.1.2.	Модель TIP3P.....	109
8.2.	Четырехцентровая модель TIP4P и ее модификации.....	110
8.3.	Пятицентровые модели.....	111
Список использованной литературы		113