

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 Нозе – 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 БИПОЛИМЕРОВ ... | | 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 |