

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
імені В. Н. КАРАЗІНА

**В. М. Трусова**  
**Г. П. Горбенко**  
**М. С. Гірич**

**ОСНОВИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМІЧНОГО  
МОДЕЛЮВАННЯ БІОПОЛІМЕРІВ**

Навчальний посібник

Харків – 2016

УДК 543.426 + 543.55 + 543.9 (076.6)

ББК 24.46я7

Т 78

**Рецензенти:**

**Г. В. Шестопалова** – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу біологічної фізики Інституту радіофізики та електроніки імені О. Я. Усикова НАН України;

**В. П. Берест** – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри молекулярної і медичної біофізики Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна.

*Затверджено до друку рішенням Вченої ради  
Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна  
(протокол № 12 від 30.11.2015 р.)*

**Трусова В. М.**

Т 78

Основи молекулярно-динамічного моделювання біополімерів : навчальний посібник / В. М. Трусова, Г. П. Горбенко, М. С. Гірич. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2016. – 212 с.

У посібнику викладені теоретичні засади та практичні аспекти методу молекулярної динаміки, розглядаються основні етапи молекулярно-динамічного моделювання білків у розчині та у мембранному оточенні з використанням програмного пакету GROMACS.

Посібник призначений для студентів, аспірантів, які вивчають комп'ютерне моделювання в біології та медицині.

**УДК 543.426 + 543.55 + 543.9 (076.6)**  
**ББК 24.46я7**

© Харківський національний університет  
імені В. Н. Каразіна, 2016

© Трусова В. М., Горбенко Г. П., Гірич М. С., 2016

© Дончик І. М., макет обкладинки, 2016

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b> .....	3
<b>РОЗДІЛ 1. Теоретичні основи методу молекулярної динаміки</b> .....	4
1.1. Статистико-механічні засади молекулярної динаміки.....	4
1.2. Рівняння руху Ньютона .....	6
1.3. Силові поля.....	7
1.4. Процедура чисельного інтегрування.....	11
1.4.1. Алгоритм Verlet.....	12
1.4.2. Leap-frog-алгоритм.....	13
1.4.3. Velocity-Verlet-алгоритм.....	14
<b>РОЗДІЛ 2. Основні етапи молекулярно-динамічного моделювання</b> .....	16
2.1. Ініціалізація.....	16
2.1.1. Початкові координати.....	16
2.1.2. Початкові швидкості.....	17
2.1.3. Періодичні граничні умови.....	18
2.1.4. Радіус обрізання.....	18
2.2. Вибір часового кроку інтегрування.....	20
2.3. Термостати та баростати.....	21
2.4. Стабільність процедури інтегрування.....	22
2.5. Протокол симуляції.....	23
<b>РОЗДІЛ 3. Підготовка до молекулярно-динамічної симуляції</b> .....	25
3.1. Банк даних 3D-структур білкових молекул.....	25
3.2. Pdb-файли.....	28
3.3. Установка Ubuntu.....	30
3.4. Установка CUDA Toolkit, GROMACS, Pymol, xmgrace та VMD.....	36
<b>РОЗДІЛ 4. Молекулярно-динамічне моделювання лізоциму у воді</b> .....	43
4.1. Крок 1: підготовка топології.....	43
4.1.1. Редагування pdb-файлу.....	43
4.1.2. Модуль pdb2gmx.....	47
4.2. Крок 2: аналіз топології.....	52
4.3. Крок 3: задання типу комірки та додавання розчинни.....	54
4.4. Крок 4: додавання іонів.....	57
4.5. Крок 5: мінімізація енергії.....	61
4.6. Крок 6: врівноваження. Частина 1.....	65
4.7. Крок 7: врівноваження. Частина 2.....	71
4.8. Крок 8: зображень МД.....	78
4.9. Крок 9: аналіз.....	81

<b>РОЗДІЛ 5. Молекулярно-динамічне моделювання пептиду KALP<sub>15</sub> у ліпідному бішарі.....</b>	<b>91</b>
5.1. Крок 1: підготовка топології.....	91
5.2. Крок 2: модифікація топології.....	94
5.3. Крок 3: задання типу комірки та додавання розчинника.....	99
5.3.1. Орієнтування білка і мембрани.....	99
5.3.2. Пакування ліпідів навколо білка.....	104
5.4. Крок 4: сольватація та додавання іонів.....	116
5.4.1. Сольватація.....	116
5.4.2. Додавання іонів.....	123
5.5. Крок 5: мінімізація енергії.....	126
5.6. Крок 6: врівноваження, частина 1.....	128
5.7. Крок 7: врівноваження, частина 2.....	136
5.8. Крок 8: розрахунок МД.....	141
5.9. Крок 9: аналіз.....	144
5.9.1. Дейтерієвий параметр порядку.....	144
5.9.2. Густина мембрани.....	144
<b>РОЗДІЛ 6. Застосування графічного інтерфейсу CHARMM-GUI.....</b>	<b>156</b>
6.1. Лізоцим у воді.....	157
6.2. Лізоцим у ліпідному бішарі.....	160
<b>РОЗДІЛ 7. Практичні рекомендації.....</b>	<b>175</b>