РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ПОТЕНЦИАЛОВ ЭФФЕКТИВНЫХ ФРАГМЕНТОВ.

Московский А.А., Акимов А.В., Григоренко Б.Л., Епифановский Е.М., Немухин А.В.

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, г.Москва

Московский А.А.
Акимов А.В.
Григоренко Б.Л.
Епифановский Е.М.
Немухин А.В.
Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

Теоретическое моделирование химических превращений требует использования таких методов расчета поверхности потенциальной энергии (ППЭ) исследуемых систем, которые бы адекватно описывали разрыв и образование химических связей. Для химических реакций, протекающих в активных центрах ферментов часто используют гибридные методы квантовой механики - молекулярной механики (КМ/ММ). В этих подходах часть системы, в которой происходит химическая реакция, описывается методами квантовой химии, а остальные молекулярные группы – более грубыми приближениями на основе классической механики.

Нами выполнена реализация программы метода молекулярной динамики, использующей для расчета ППЭ системы метод КМ/ММ, предложенный в [1]. Поскольку в используемом методе КМ/ММ молекулярно-механическая часть представлена в виде набора фрагментов, в которых взаимное расположение атомов жестко фиксировано, осуществлена реализации метода молекулярной динамики с жесткими фрагментами. Вычисления методом КМ/ММ выполняются при помощи пакета PC GAMESS [2], причём нами был реализован интерфейсный модуль для передачи результатов квантовохимического расчёта (силы, действующие на атомы и фрагменты) из выходного файла пакета PC GAMESS. Программа позволяет выполнять расчёты с использованием методики молекулярно-динамического моделирования при постоянной температуре с цепочечным термостатом Носе-Гувера.

При помощи разработанной программы был проведен расчёт молекулярной динамики дипептида N-ацетил-L-аланин N'-метиламида (AAMA) с четыремя молекулами воды. Квантовая часть системы состояла из 4-х молекул воды, а классическая – из молекулы AAMA, разбитой на жесткие фрагменты. Квантовохимический расчёт выполнялся методом ограниченного Хартри-Фока (ОХФ) в базисе DH(d,p). Для молекулярно-механической подсистемы в серии расчетов использовались поля MM3, OOPLSAA, CHARMM. Несмотря на то, что для расчёты проводились на обычном персональном компьютере (процессор Athlon XP 1800+, 1024 Мбайт ОЗУ), программа позволяет рассчитывать траектории длиной до нескольких десятков пикосекунд.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проекты № 06-03-33009-а и 05-07-90146-в).

Литература

1. *Nemukhin A.V., Grigorenko B.L., Topol I.A., Burt S.K.,* Flexible effective fragment QM/MM method: Validation through the challenging tests // J.Comp.Chem. 2003, V.24, P.1410-1420
2. *А. А. Грановский,* URL http://lcc.chem.msu.ru/gran/gamess/index.html.