

АВТОМАТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ГЕНЕРАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНО-МЕХАНИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ ИХ ХЕМИНФОРМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Нестеренко А.М., Зленко Д.В.¹, Галочкина Т.В.¹, Мамонов П.А.³

НИИФХБ имени А.Н. Белозерского МГУ, Россия, 119991, Москва

¹Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 119234, Москва

²ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Россия, 117218, Москва

Создание силового поля (топологии) - нетривиальная и достаточно сложно автоматизируемая задача, лежащая в начале любого нетривиального молекулярно-динамического расчета. На сегодняшний день известно несколько примеров автоматизации процедуры создания силового поля для заранее неизвестного низкомолекулярного органического соединения, однако ни один из них пока не удовлетворяет всем нуждам вычислительной химии.

Нами была разработана технология, которая позволяет создавать топологии низкомолекулярных соединений на основе химического "выравнивания" фрагментов соединения по заранее подготовленным таблицам атомных типов. В основе технологии лежит разработанный авторами алгоритм ТРРМКТОР, который использует специально подготовленную и постоянно обновляемую базу данных химических фрагментов. Алгоритм ассоциирует химические фрагменты из базы с фрагментами молекулы и решает, какие типы атомов лучше применять в конкретном случае. Сейчас программа настроена на работу с силовым полем OPLS-AA, однако принципиально может быть настроена и на другие поля. В ходе работы над программой мы развили протоколы расширения поля, а также протоколы обновления базы данных фрагментов. Каждый добавленный в базу фрагмент расширяет спектр молекул, топологии которых могут быть созданы. Важным преимуществом нашей схемы является генерация топологий без выполнения квантово-химических расчетов.