

## **ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ – МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

**Калиман И.А., Московский А.А., Немухин А.В.**

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова,  
Химический ф-т, каф. Физической химии,  
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, к. ц-69б,  
тел.: (495) 939-10-96, факс: (495) 939-02-83,  
E-mail: ilya.kaliman@gmail.com

Установление механизмов химических реакций представляет собой одну из главных задач современной квантовой химии. С развитием высокопроизводительных вычислений в последнее время всё большее внимание привлекает исследование больших биологических систем, таких как белки. Для моделирования подобных систем особый интерес представляет использование методов молекулярной динамики с использованием неэмпирических методов для описания межатомных взаимодействий, позволяющих описывать процессы разрыва и образования химических связей.

В данной работе проведено моделирование реакции переноса протона в канале грамицидина А с использованием неэмпирических методов квантовой химии реализованных в оригинальном программном пакете. Рассчитаны профили свободной энергии для различных стадий данного процесса. Использование метода зонтичной выборки позволило проводить расчёты с высокой параллельной эффективностью, без чего не было бы осуществление столь ресурсоёмких задач. В ходе работы проведено сравнение различных методов для описания исследуемой системы и охарактеризована даваемая ими точность.

Нами было проведено моделирование трёх стадий процесса переноса протона – непосредственно перенос протона, перенос ионного дефекта и переориентация цепи из молекул воды. В ходе исследования определено, что наиболее энергетически выгодным является механизм непосредственного переноса протона (механизм Гроттуса), а скорость определяющей стадией является переориентация молекул воды в канале. Были получены профили свободной энергии для каждой из этих стадий. Детально исследована скорость определяющая стадия процесса – переориентация молекул воды в цепи. Для описания системы были применены комбинированные методы квантовой и молекулярной механики, позволяющие с высокой степенью точности описывать исследуемую систему. Описание квантовой части проводили на уровне теории функционала электронной плотности с использованием гибридного функционала B3LYP. Для описания молекулярно-механической части применяли эмпирическое силовое поле AMBER96. Определено, что барьер свободной энергии для стадии переориентации цепи из молекул воды составляет порядка 7.7 ккал/моль, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.