

# МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ЛИПИДОВ, ВЫЯВЛЯЕМЫЕ МЕТОДАМИ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Иванова А.В., Бескачко В.П.

Южно-Уральский государственный университет, Российская Федерация, 454080,  
Челябинск, пр. Ленина д.76, +7 (351) 267 92 28, Nastya.V.Ivanova@gmail.com

Среди многих методов оценки энергетических параметров крупнозернистых моделей биомолекул широкое распространение получил метод [1], основанный на огрублении молекулярной структуры с использованием полноатомного молекулярно-динамического моделирования и подгонки его результатов под опытные данные. Другой возможностью является оценка этих параметров подгонкой под данные, которые можно определить с помощью первопринципных расчетов свойств биомолекул. Целью настоящей работы является расчет *ab-initio* механических свойств липидов с последующей параметризацией крупнозернистой их модели.

Объектом исследования являлась молекула ДПФХ. Ее начальная конфигурация оптимизировалась методом Хартри-Фока (RHF) в базисе 3-21G с использованием квантово-химического пакета Firefly [2,3] на кластере СКИФ-Урал ЮУрГУ. Затем посредством малой ( $\epsilon \sim 10^{-2}$ ) однородной деформации вдоль какой-либо оси создавалась новая конфигурация, крайние атомы которой «замораживались», а положения остальных атомов вновь оптимизировались указанной выше процедурой и оценивалась полная энергия новой конфигурации. Далее процедура повторялась до тех пор, пока не наступало разрушение молекулы. Результатом расчетов явились зависимости энергии системы от величины деформации, которые были использованы для определения ее упругих свойств. Последние использовались для оценки параметров межчастичного взаимодействия в крупнозернистой модели указанного липида. Такой подход позволяет также еще на этапе квантово-химического моделирования выявить относительно жесткие фрагменты в молекуле, которые следует отнести к одной укрупненной частице и оправдать применение той или иной формы межчастичного потенциала.

## Литература

1. Marrink S.J., Risselada H.J., Yefimov S., Tieleman D.P., de Vries A.H. The MARTINI forcefield: coarse grained model for biomolecular simulations//*J. Phys. Chem. B*, **111**, 27, 2007, 7812-7824
2. Alex A. Granovsky, Firefly version 7.1.G, <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html>
3. Schmidt M.W., Baldrige K.K., Boatz J.A. и др. Advances in electronic structure theory: GAMESS a decade later//*Journal of Computational Chemistry*, **14**, 11, 1993, 1347-1363