

# Влияние параметров молекулярной динамики на характерные времена движения белков



студенты:  
Лебеденко Ольга  
Легковой Станислав

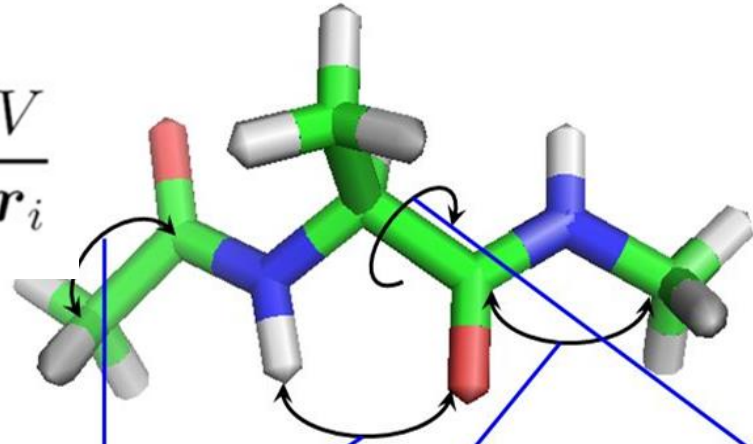
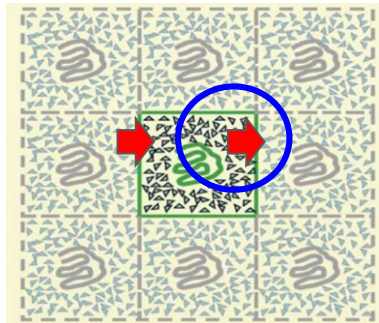
*руководители:*  
*Николай Скрынников (СПбГУ / Purdue University)*  
*Сергей Измайлов (СПбГУ)*

# Молекулярная динамика (МД)

Второй закон Ньютона для произвольного атома  $i$  моделируемой системы

$$m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \mathbf{F}_i = - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}$$

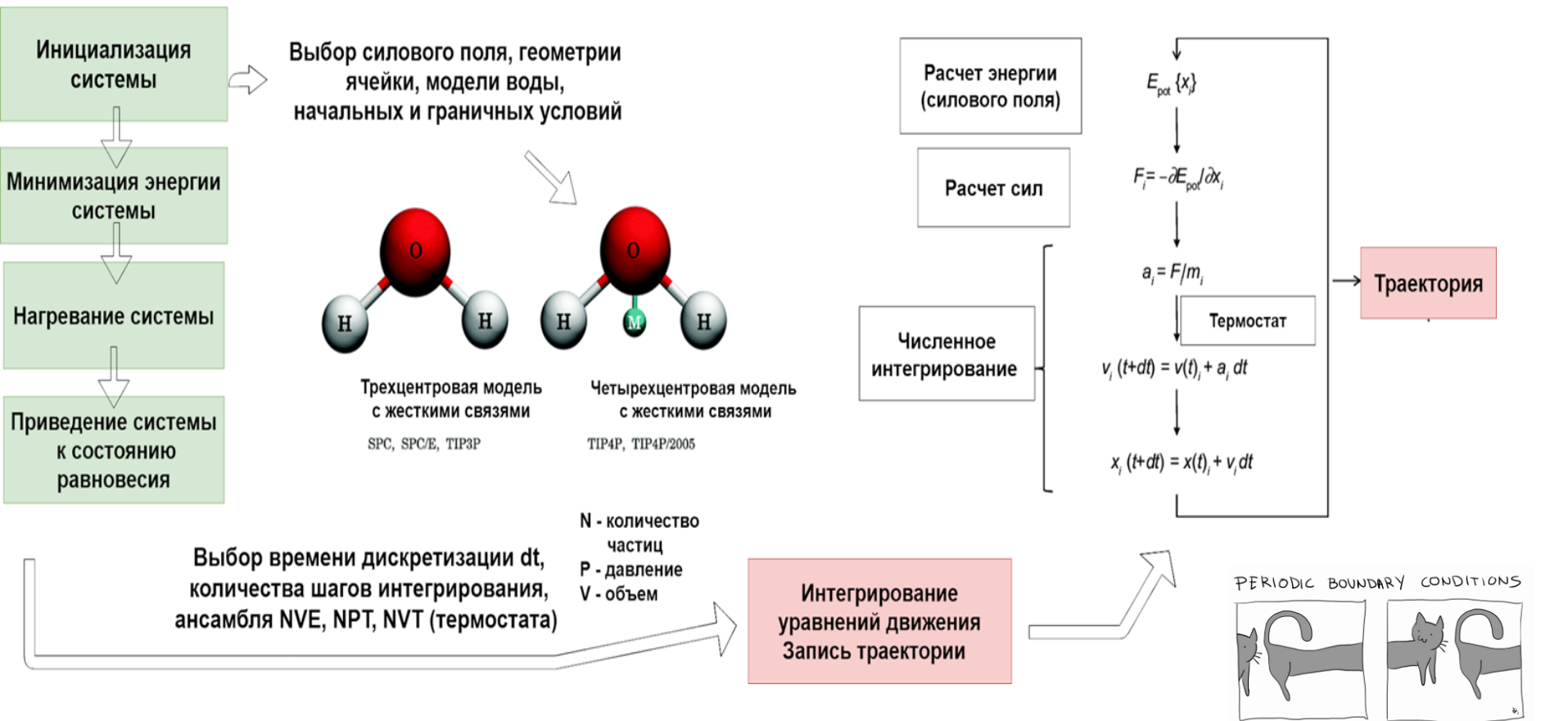
1. Начальные условия
2. Периодические граничные условия



$$E = \frac{1}{2} \sum_{\text{bonds}} k_i^d (d_i - d_i^o)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\text{angles}} k_i^\theta (\theta_i - \theta_i^o)^2 + \sum_{\text{dihedral angles}} \sum_n \frac{V_n}{2} \cos(n\gamma + \varphi) + \sum_{i < j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_{ij}^0}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

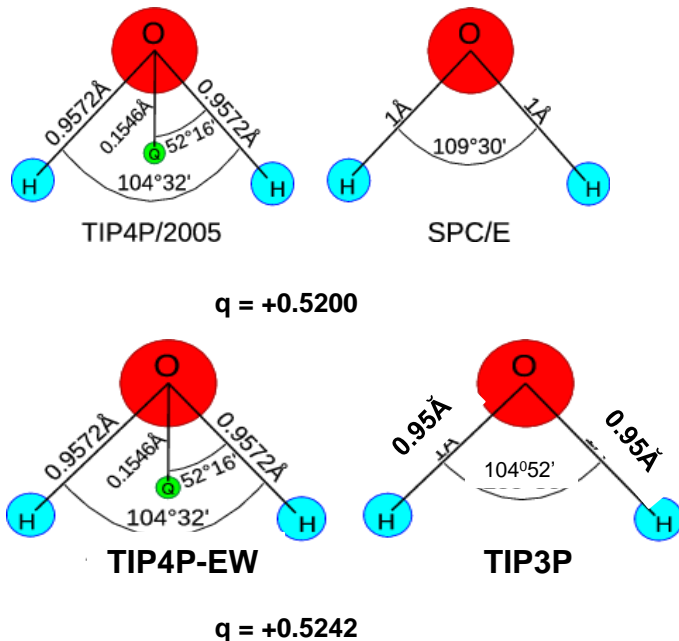
Набор констант определяет силовое поле

# Шаги молекулярной динамики



# Исследуемые параметры:

МОДЕЛЬ ВОДЫ X



АНСАМБЛЬ X

NVT  $\gamma = 0.01$

NVE

NPT  $\gamma = 0.01$

NPT  $\gamma = 2$

БЕЛОК = 32 траектории

ubq - глобулярный белок (76 а.о.)

h4 - разупорядоченный пептид (25 а.о.)

Силовое поле:

**Amber ff14SB**

**Цель проекта:** определение оптимальных параметров МД на примере глобулярного белка - убиквитина (ubq) и разупорядоченного пептида - N-терминальной части гистона H4 (h4)

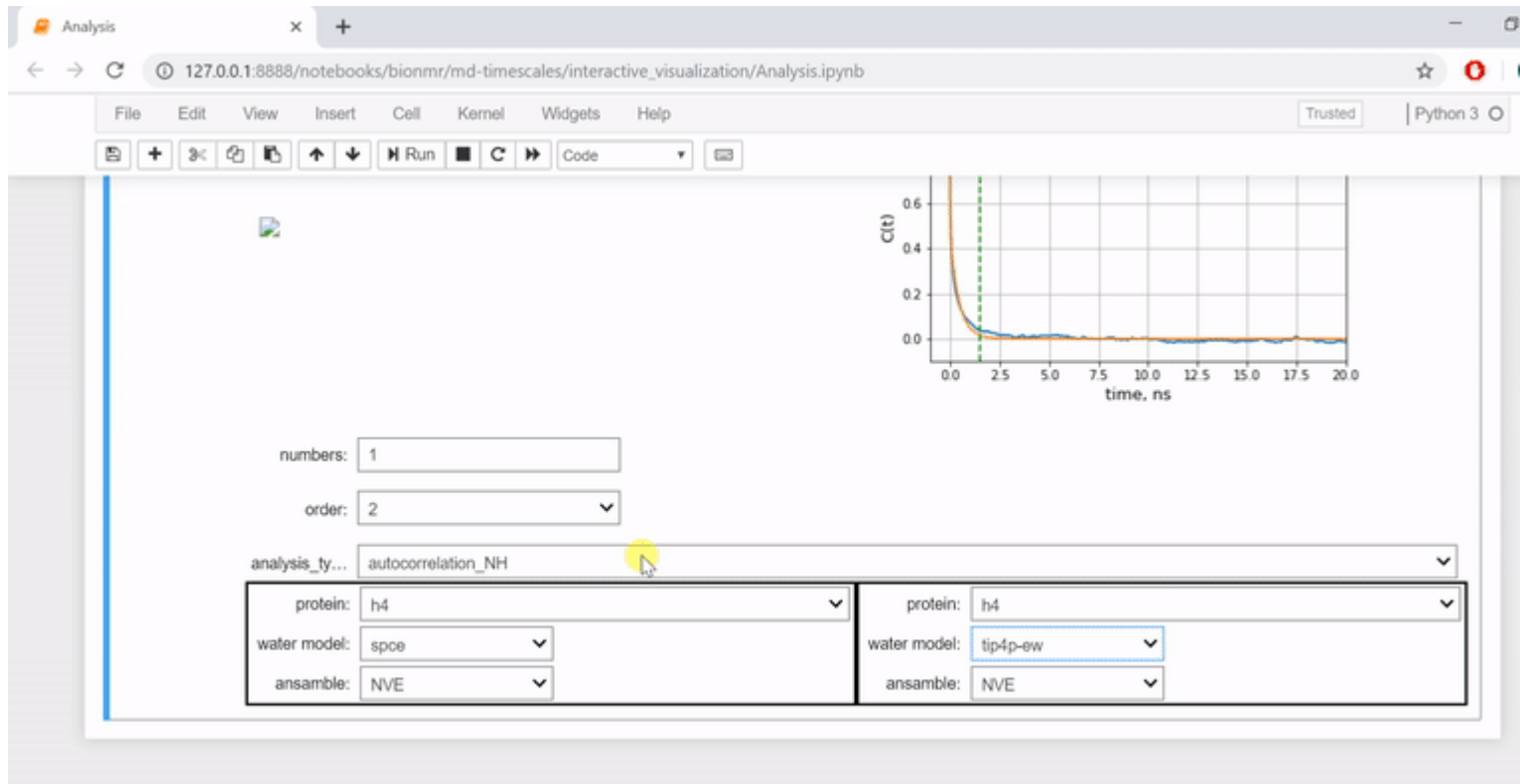
**Задачи:** выяснить влияние выбора

- модели воды,
- ансамбля,
- параметров термостата

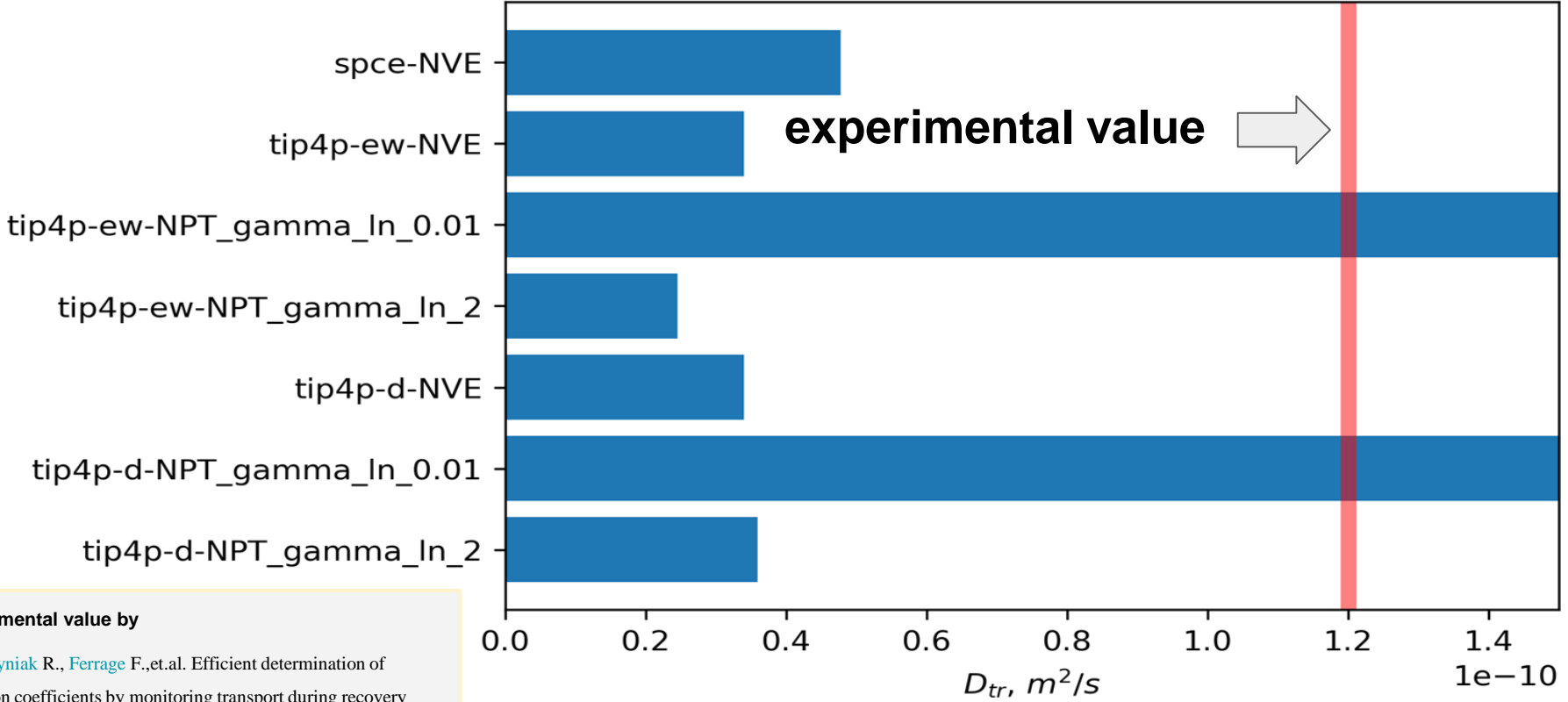
на времена:

- вращения белка как целого
- трансляционного движения

# Визуализация и сравнение результатов в ipython notebook



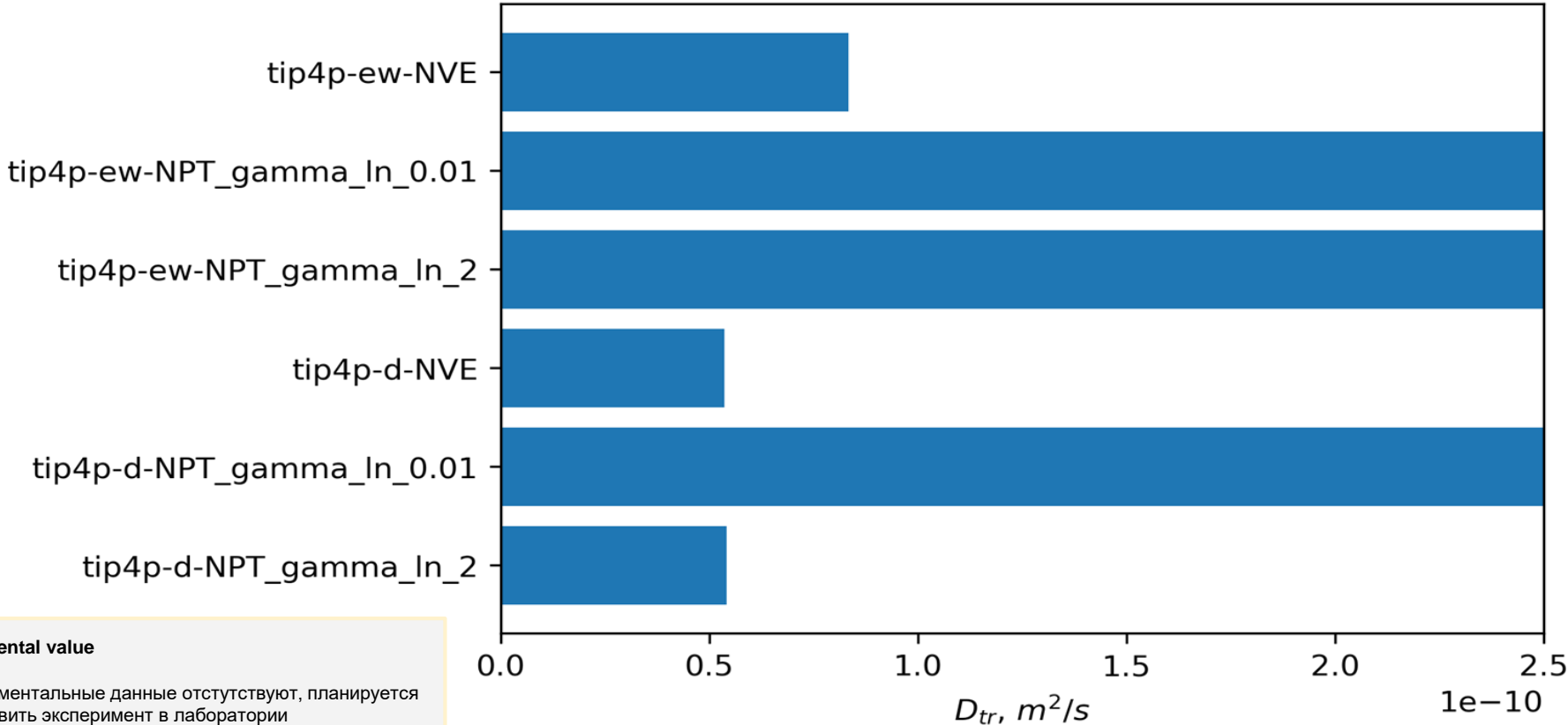
# Коэффициент трансляционной диффузии $D_{tr}$



experimental value by  
[Augustyniak R., Ferrage F., et.al. Efficient determination of diffusion coefficients by monitoring transport during recovery](https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2012/cc/c2cc30578j#!divAbstract)  
<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2012/cc/c2cc30578j#!divAbstract>

# Коэффициент трансляционной диффузии $D_{tr}$ для

h4

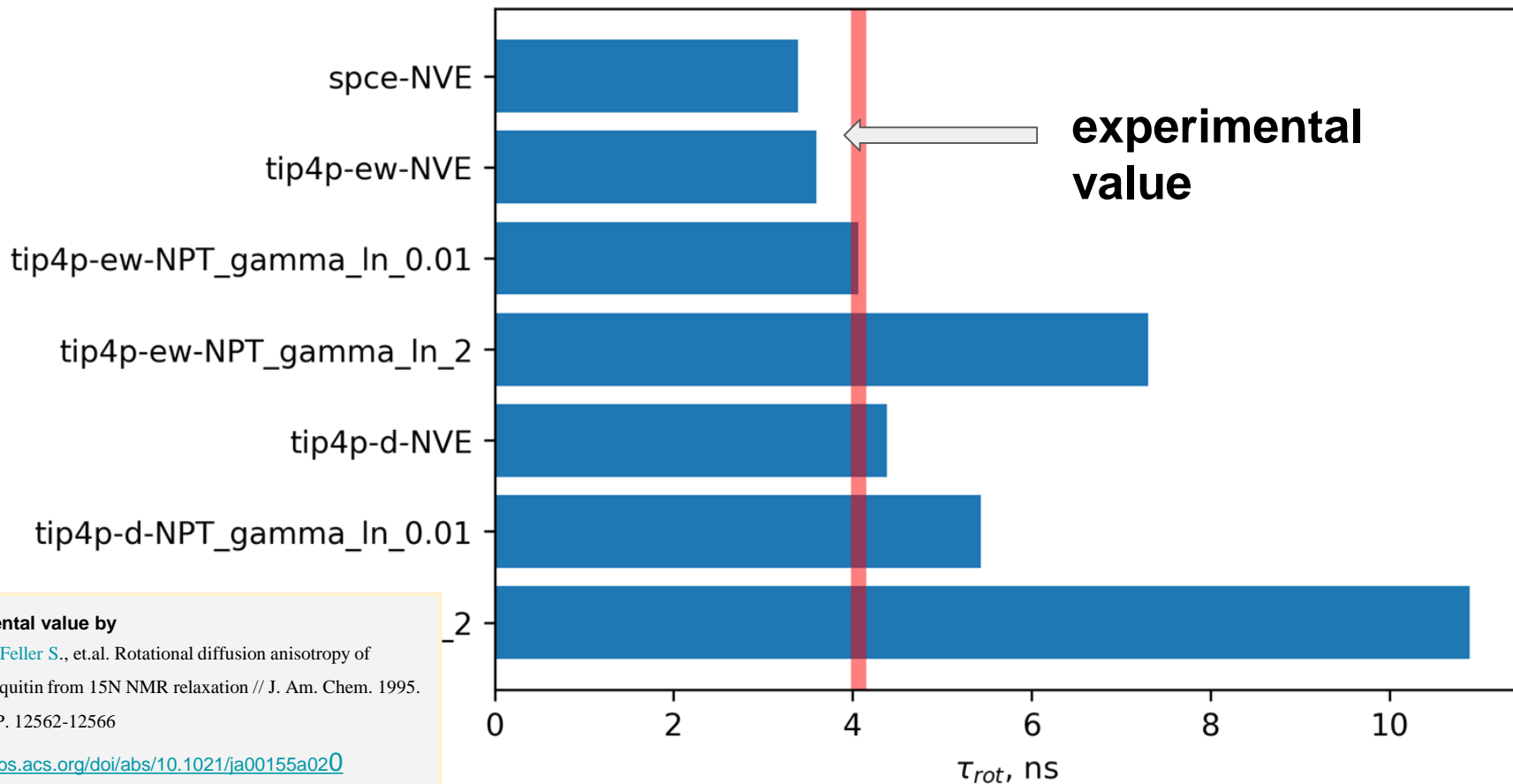


**experimental value**  
Экспериментальные данные отсутствуют, планируется осуществить эксперимент в лаборатории биомолекулярного ЯМР СПбГУ



# Коэффициент ротационной диффузии $t_{rot}$ для

ubq



experimental value by

Jandra N., Feller S., et.al. Rotational diffusion anisotropy of human ubiquitin from  $^{15}\text{N}$  NMR relaxation // J. Am. Chem. 1995. Vol. 117. P. 12562-12566

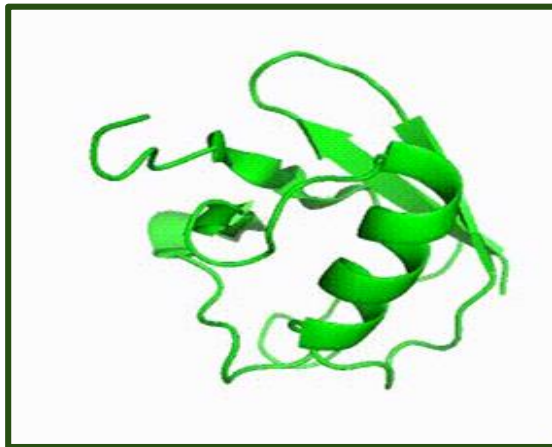
<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja00155a020>

# Молекулярная динамика ubq

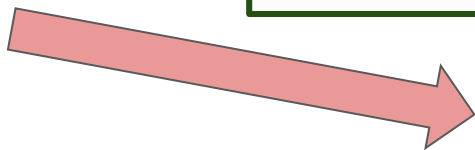
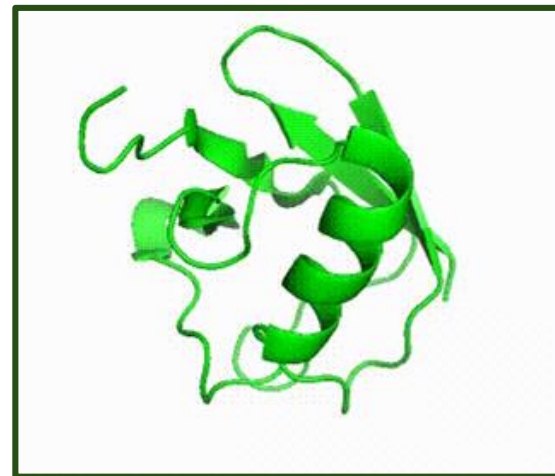
tip4p-ew NVE



tip4p-ew NPT  $\gamma=0.01$



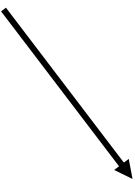
tip4p-ew NPT  $\gamma=2$



**Замедление динамики**

# Результаты и выводы:

- Завершена обработка 15 траекторий: 8 из них для ubq и 7 для h4
- Рассмотренные траектории молекулярной динамики не воспроизводят экспериментальный коэффициент  $D_{tr}$  для ubq
- Траектории МД с параметрами согласуются с экспериментальным значением  $t_{rot}$  для ubq



water model	ensamble
spce	NVE
tip4p-ew	NVE
tip4p-ew	NPT_gamma_ln_2
tip4p-d	NVE

# Спасибо за внимание!

GitHub: <https://github.com/OOLebedenko/md-timescales>