



Rysunek 6.5. Przykład małego układu, typowego dla symulacji biocząsteczek. Cząsteczkę białka krambiny przedstawiono w postaci wstążki z uwidocznionymi α -helisami, a cząsteczki wody pokazano za pomocą modeli kulkowych

strukturalne. Obliczenia pomagają również zrozumieć proces *solwatacji* cząsteczek biologicznych, czyli sposób, w jaki cząsteczki rozpuszczalnika układają się wokół różnych fragmentów biocząsteczki.

Kolejną silną stroną symulacji jest możliwość przewidywania struktur przyjmowanych przez układy oddziałujących ze sobą cząsteczek. Typowym przykładem mogą tu być układy, w których enzym łączy się z substratem lub inhibitorem, bądź też cząsteczka leku oddziałuje z cząsteczką białka-gospodarza. Znajomość miejsca, w którym lek wiąże się z białkiem docelowym, jest często bardzo ważna podczas pracy nad jego dalszym rozwojem. Z pomiarów eksperymentalnych można określić strukturę białka, ale nie można poznać szczegółowego opisu mechanizmu, w jaki oddziałuje ono z mniejszymi cząsteczkami. Obliczenia dostarczają w takich przypadkach brakujących szczegółów. Pewnych wskazówek dotyczących preferowanego miejsca wiązania dostarcza już proste połączenie mechaniki molekularnej z optymalizacją geometrii (w tym kontekście tę technikę nazywa się „dokowaniem”). Za pomocą metod opisanych w rozdziale 7 można również opisać takie oddziaływania w kategoriach termodynamicznych.

6.6. Literatura uzupełniająca

Symulacje MD i Monte Carlo często łączy się z obliczeniami energii swobodnej, które opisano w następnym rozdziale. Podana tam literatura odnosi się więc również do zagadnień opisanych w tym rozdziale.

- Rapaport D.C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, Cambridge 2004.
Książka ta dostarcza wyczerpującego opisu metody MD i jej zastosowań.

- Levine R., *Molecular Reaction Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge 2005. Książka opisuje zarówno eksperymentalne, jak też obliczeniowe aspekty dynamiki reakcji chemicznych. Pozwala ona pogłębić wiedzę na temat możliwości wykorzystania obliczonych trajektorii w celu zrozumienia przebiegu reakcji chemicznych.
- Head-Gordon T., Hura G., *Water Structures from Scattering Experiments and Simulation*, Chemical Reviews, 2002, **102**, 2651–2670. Ten artykuł przeglądowy może stanowić wstęp do studiowania niezwykle obszernej literatury dotyczącej struktury wody w stanie ciekłym. Przedyskutowano w nim również rolę symulacji w pogłębianiu wiedzy na ten ważny temat.

6.7. Ćwiczenia

- 6.1. Jak na standardy chemii obliczeniowej, wyrażenia matematyczne pojawiające się w prostej dynamice molekularnej nie są zbyt skomplikowane, więc napisanie własnego programu jest wykonalnym, małym projektem. Wykorzystując jedynie potencjał Lennarda-Jonesa opisany równaniem (4.5) i stosując algorytm Verleta opisany równaniami (6.5), napisz własny program służący do symulacji ciekłego argonu.
- 6.2. Wykorzystując jeden z dostępnych pakietów obliczeniowych do dynamiki molekularnej, przeprowadź symulację ciekłej wody, podobną do tej opisanej w rozdziale. Do wizualizacji wyników użyj dowolnego programu graficznego. W niektórych pakietach lub programach graficznych może być dostępna opcja pozwalająca na obliczenie funkcji rozkładu radialnego.
- 6.3. Dla tego samego układu co w zadaniu 6.2 wykonaj symulację Monte Carlo i sprawdź, czy prowadzi ona do takiej samej funkcji rozkładu radialnego jak symulacja MD.

6.8. Podsumowanie

- Dla złożonych układów „statyczne” badanie własności powierzchni energii potencjalnej nie wystarczy do tego, aby przewidzieć zachowanie opisywanego przez nią układu.
- Metody symulacyjne próbują zbiór struktur przyjmowanych przez układ w zadanych warunkach eksperymentalnych.
- W symulacjach dynamiki molekularnej próbkowanie polega na zastosowaniu zasad dynamiki Newtona do ruchu atomów.
- Symulacje Monte Carlo zamiast tego stosują losowe zmiany struktury oraz odpowiedni algorytm, według którego zmiany te są akceptowane bądź odrzucane, zgodnie z rozkładem Maxwella-Boltzmannna.
- Zgromadzone struktury mogą być analizowane przez obliczenie własności średnich, jak np. funkcji rozkładu radialnego.
- Najczęstszym zastosowaniem metod symulacji dynamicznych jest badanie biocząsteczek, ich zmienności strukturalnej oraz ich oddziaływań z innymi cząsteczkami.