

Создание универсального QM/MM-интерфейса

Мальков Максим Николаевич

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет
биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия

E-mail: neoblako@gmail.com

Вычислительные методы, такие как моделирование молекулярной динамики прочно вошли в арсенал методов для изучения структур и динамики биомолекул. Однако моделирование реакций в ферментах при помощи этих методов вызывало проблему. Основной барьер - невозможность моделирование целого фермента при помощи квантово-механических расчетов, в силу огромного вычислительного времени, которого требуют расчеты для систем такого размера.

Перспективным подходом является гибридное QM/MM-моделирование - где большая часть системы моделируется «быстрыми» методами молекулярной механики, а активный центр «медленными» квантово-механическими расчетами. Однако, распространение этой методологии затруднено из-за отсутствия удобных инструментов, комбинирующих мощные и признанные в

сообществе вычислительные пакеты.

Целью настоящей работы является реализация универсального программного интерфейса и вспомогательных инструментов, которые позволят объединить один из самых популярных пакетов для моделирования молекулярной динамики GROMACS с набором ключевых программ для квантово-химических расчетов: MOPAC2012, ORCA, Firefly, GAMESS-US, Gaussian и др.

Особенностью интерфейса является система плагинов на языке программирования Python для минимизации затрат на интеграцию новых пакетов для квантово-химических расчетов

Слова благодарности

Андрей Головин, Артур Залевский