

Практические занятия
по курсу "Численные методы в биотехнологии"

Цымай Д.В.
dmitryzy@gmail.com

1 Практическое занятие 1. Работа с программой Avogadro

Avogadro - многофункциональный инструмент, разработанный для использования на нескольких платформах (в частности на ОС Windows), предназначенный для молекулярного моделирования, по вычислительной химии, квантовой химии, биоинформатики, наук о материалах и родственных областей научного знания.

Позиционируется Avogadro (Open Molecules, Inc) как Free cross-platform molecule editor. Страница программы <http://avogadro.openmolecules.net/>

1.1 Описание возможностей и работа с программой

1.1.1 Avogadro. Просмотр структуры

Скачайте из интернета и откройте файл (PDB-файл инсулина):

<http://wbiomed.curtin.edu.au/biochem/tutorials/pdb/1hiu.pdb>

(под ОС Windows должен быть сохранен в каталоге установки Avogadro)

Откройте сайт PDB — Protein Data Bank(<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>)

Воспользовавшись системой поиска сайта, скачайте структурные файлы (формат *.pdb):

1. 1HEA

2. 3RBF

3. 3RBL

4. 1AM5

5. 4NIZ

6. 3AUC

7. 3AUH

8. 3B8G

9. 3D2P

10. 2LDJ

11. 4KAG

12. 4KEX

13. 3TX6

14. 1R1O

15. 1W5J

Рассмотрите их структуру, используя инструменты программы AVOGADRO.

1.1.2 Avogadro. Ввод структуры

Цифрами обозначены основные кнопки, которыми мы будем пользоваться при создании молекулы:

1. Непосредственно, ввод структуры. «Рисование» молекулы.
2. Вращение и перемещение молекулы по экрану.
3. Оптимизация структуры методом молекулярной механики.

Ввод структуры молекулы осуществляется просто: нажатие левой кнопки мыши ставит атом, соответствующий значению поля «Элемент» (слева от области ввода), если при перемещении курсора левая кнопка мыши удерживается нажатой, то между атомами проводится связь, соответствующая значению поля «Порядок связи». В начале работы лучше убрать флагок в поле «Автодобавление водорода». Нажатие левой кнопки мыши убирает атомы и связи в положении курсора.

Необходимые атомы водорода добавляются автоматически при выборе в меню «Построение» пункта «Добавить атомы водорода». Далее, следует выполнить предварительную оптимизацию структуры, нажав кнопку 3 и кнопку «Начать» на панели слева. Как только атомы закончат видимое перемещение можно нажимать кнопку «Остановить» - формирование структуры завершено.

1.2 СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ ОДИНОЧНОЙ МОЛЕКУЛЫ СРЕДСТВАМИ ПРОГРАММЫ AVOGADRO

1. Используя программу AVOGADRO нарисовать геометрию предложенной молекулы. CH_3Cl , CH_2Cl_2 , CCl_2F_2 , NHF_2 , $CHCl_3$, NH_2Cl
2. Найдите оптимальную геометрию молекулы при помощи инструмента "оптимизация"
3. Сохранить результат в виде файлов формата PDB и GZMAT (Z-матрица)
4. Описать процесс кодирования молекулы (нарисовать на координатной плоскости X-Y структурную формулу и показать на ней нумерацию атомов и код присваиваемый каждому атому) на основе структуры и нумерации атомов предложенной пакетом AVOGADRO.

1.3 СОЗДАНИЕ МОДЕЛИ СЛОЖНОЙ МОЛЕКУЛЫ СРЕДСТВАМИ ПРОГРАММЫ AVOGADRO

1. Используя программу AVOGADRO нарисовать геометрию предложенной молекулы: пропановая кислота, бутановая кислота, пентановая кислота, гексановая кислота, гептановая кислота, октановая кислота, ионановая кислота, декановая кислота, 2-бутеновая кислота, 3-бутеновая кислота, муравьиная кислота, уксусная кислота, молочная кислота.
2. Найдите оптимальную геометрию молекулы при помощи инструмента "оптимизация"
3. Сохранить результат в виде файлов формата PDB и GZMAT (Z-матрица)
4. Описать процесс кодирования молекулы (нарисовать на координатной плоскости X-Y структурную формулу и показать на ней нумерацию атомов и код присваиваемый каждому атому) на основе структуры и нумерации атомов предложенной пакетом AVOGADRO.