



دانشگاه صنعتی شریف
دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

کلاس تدریس‌یار دینامیک مولکولی
تبدیل انرژی

عنوان:

تمرین دوم

نگارش:

محمد عرفان حمدی - ۹۹۲۰۹۰۴۱

مدرس:

حسین شایگانی

مهر ۱۴۰۰

فهرست مطالب

۱	محاسبه مدول یانگ پروتئین 1UBQ	۱
۱	۱-۱ برآزش منحنی	۱
۸	۱-۲ محاسبه مدول یانگ	۸
۱۰	۲ ساختار فایل های ورودی	۱۰
۱۰	۱-۲ فایل های PDB	۱۰
۱۱	۲-۲ فایل های PSF	۱۱

فهرست شکل‌ها

- ۱-۱ وارد کردن مولکول جدید ۲
- ۲-۱ وارد کردن داده‌های مربوط به نیرو ۲
- ۳-۱ ایجاد کردن دو حالت نمایش ۳
- ۴-۱ تغییر حالت نمایش به ۳
- ۵-۱ انتخاب شماره residue برای نمایش دادن ۴
- ۶-۱ تغییر حالت رنگ آمیزی بر اساس نوع عنصر ۴
- ۷-۱ محاسبه فاصله پیوند بین دو اتم ۵
- ۸-۱ بدست آوردن گراف فاصله ۵
- ۹-۱ اندازه پیوند ۶
- ۱۰-۱ فیت شدن منحنی چندجمله‌ای درجه ۸ بر روی داده‌ها ۷
- ۱-۲ ساختار فایل PDB ۱۰

فصل ۱

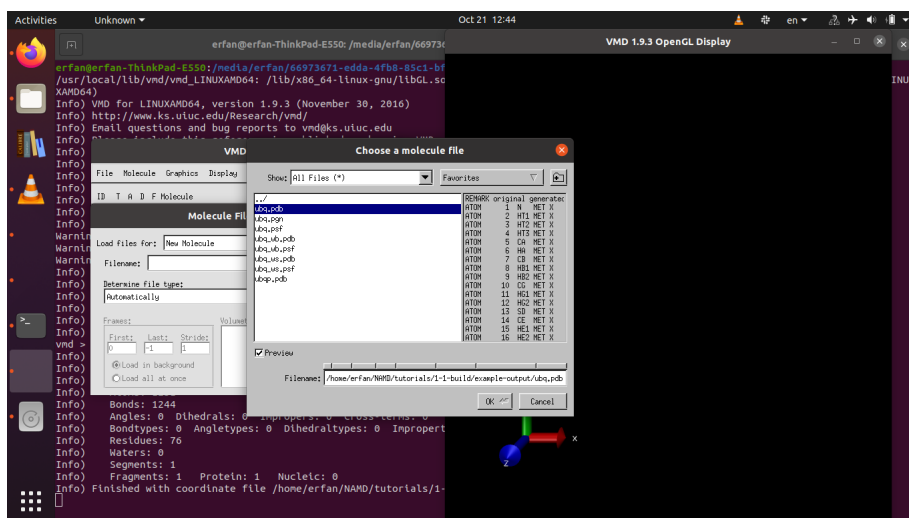
محاسبه مدول یانگ پروتئین 1UBQ

۱-۱ برآزش منحنی

پس از اینکه نرم افزار VMD را در ترمینال لینوکس با وارد کردن دستور vmd در پوشه مدنظر اجرا شد، با استفاده از منوی فایل، فایل مربوط به ubq.pdb که در دایرکتوری

tutorials/1-1-build/example-output/ubq.pdb

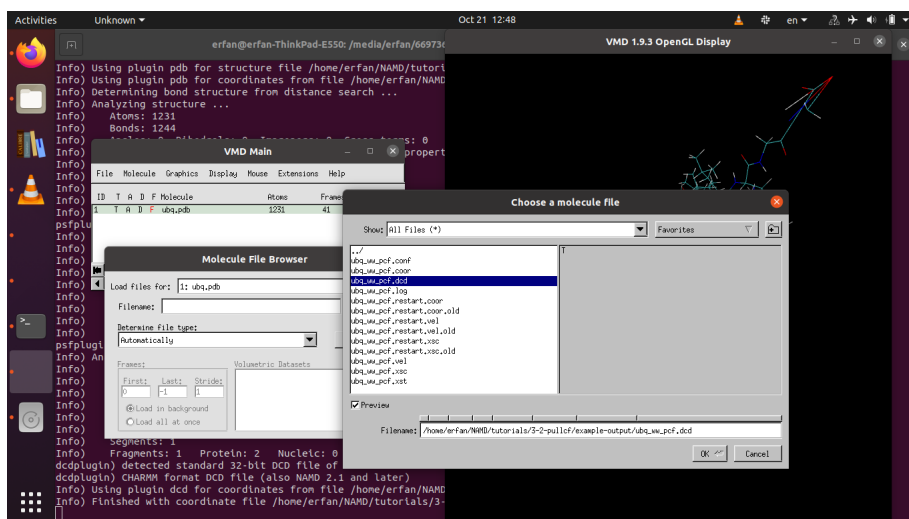
وجود دارد بارگذاری میشود.



شکل ۱-۱: وارد کردن مولکول جدید

در مرحله بعد به منظور اعمال نیرو روی مولکول بر روی مولکول کلیک راست کرده و گزینه Load Data into Molecule را انتخاب کرده و سپس فایل مربوط به اعمال نیروی کششی ثابت به پروتئین یوبیکوئیتین را از این دایرکتوری انتخاب میکنیم.

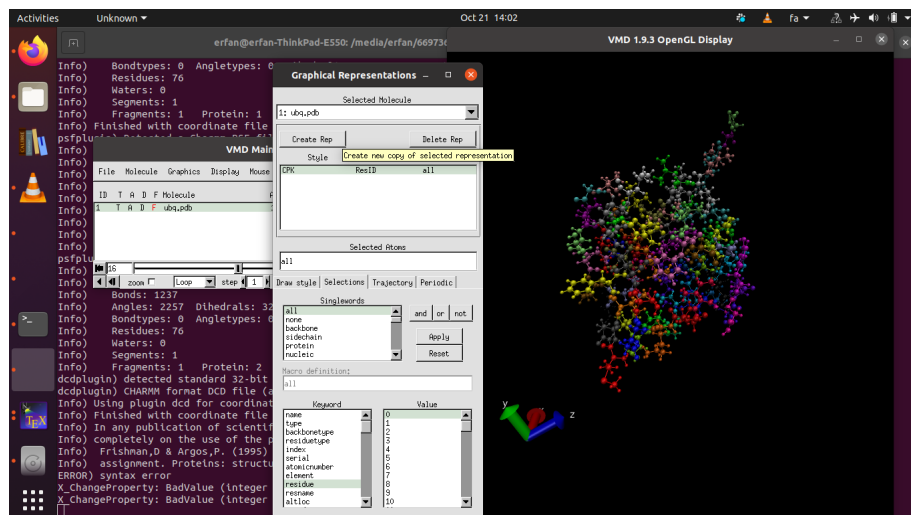
tutorials/3-2-pullcf/example-output/ubq_ww_pcf.dcd



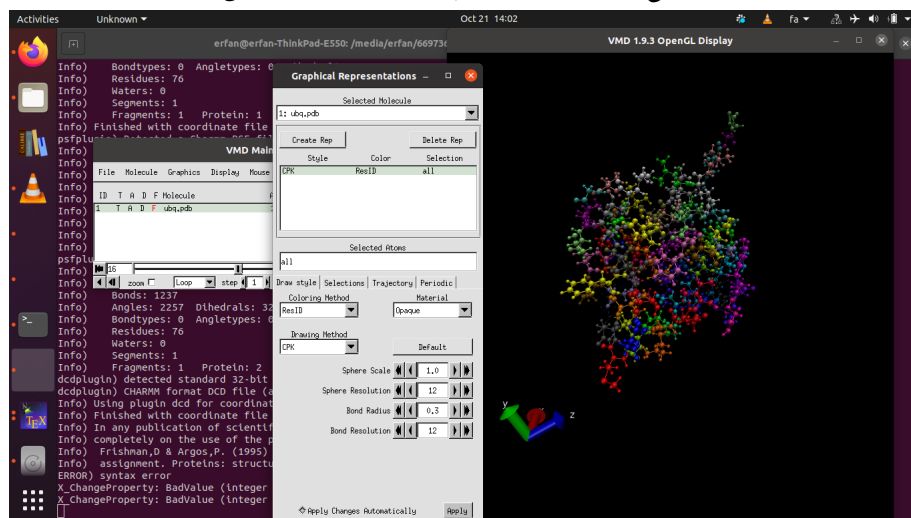
شکل ۱-۲: وارد کردن داده های مربوط به نیرو

با انجام این کار ۴۱ فریم روی مولکول لود میشود. در مرحله بعد به منظور محاسبه میزان کرنش بایستی که فاصله بین دو residue ابتدا و انتها را در طی این زمان ثبت کرد. به همین منظور در منوی Graphics و در گزینه Representations با کلیک بر روی دکمه Create Rep دو حالت نمایش برای

این مولکول ایجاد میکنیم. یکی برای residue اول و دیگری برای آخرین residue، حالت نمایش این دو را نیز در تب Drawing Styles به حالت CPK تغییر میدهم.

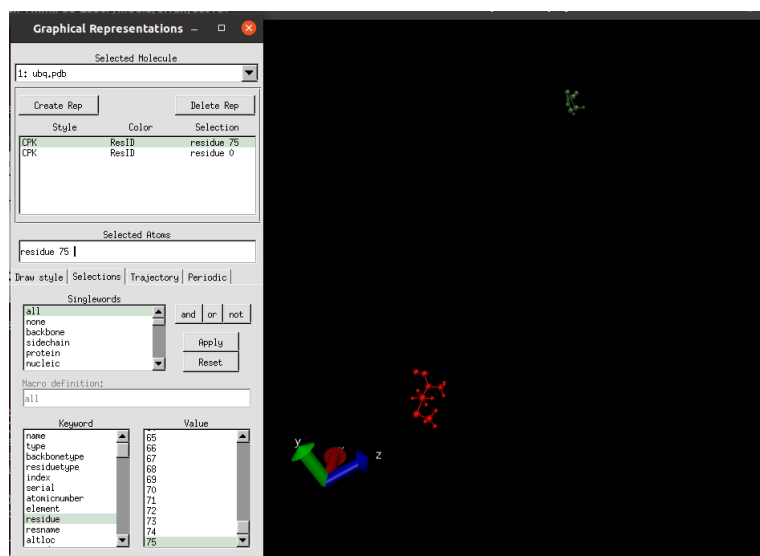


شکل ۱-۳: ایجاد کردن دو حالت نمایش



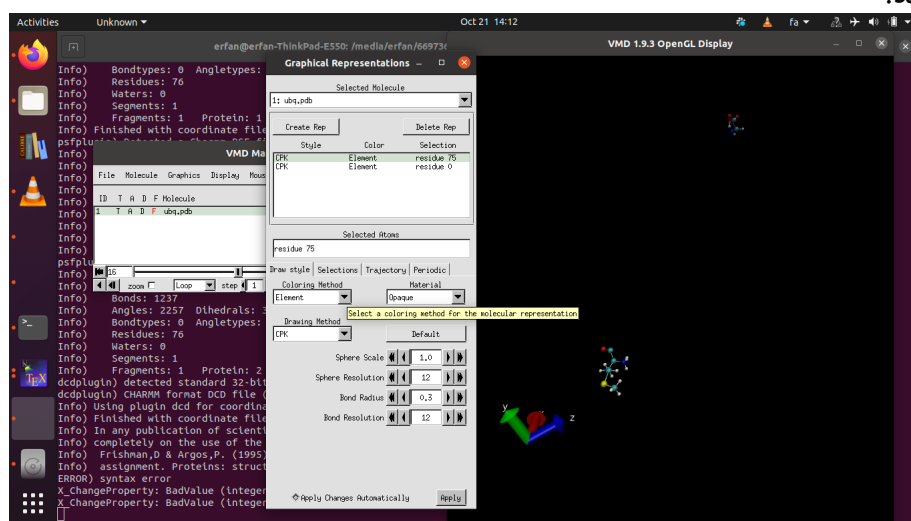
شکل ۱-۴: تغییر حالت نمایش به

سپس با استفاده از دو جدول در انتهای پنجره مربوط به Keywords و Value دو residue اول و آخر انتخاب میشوند. در سیستم عامل اوبونتو شماره residue ها از ۰ شروع میشود.



شکل ۱-۵: انتخاب شماره residue برای نمایش دادن

سپس حالت رنگ آمیزی در تب Draw Style و با گزینه Coloring Method به حالت Element تغییر داده میشود تا اتم های نیتروژن در ابتدا و اتم کربن در انتها به عنوان ترمینال های شروع و پایان انتخاب شوند.

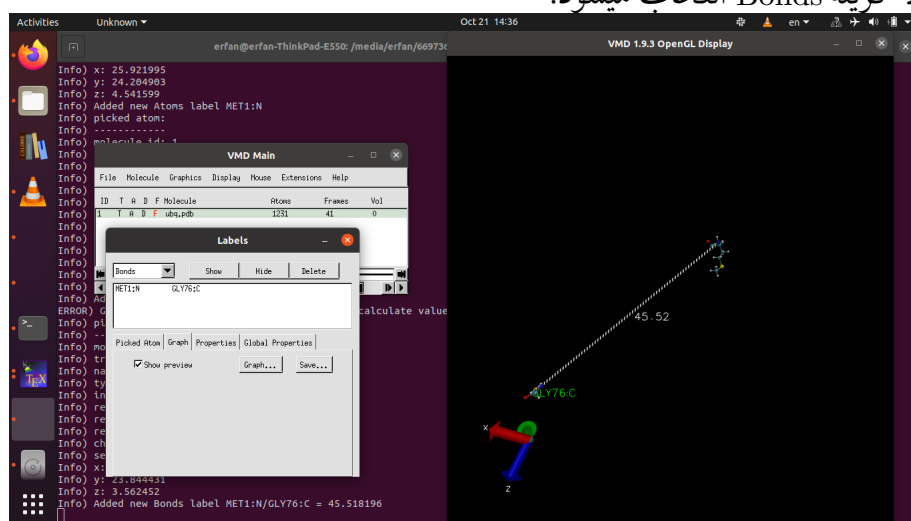


شکل ۱-۶: تغییر حالت رنگ آمیزی بر اساس نوع عنصر

در رنگ آمیزی بر حسب نوع عنصر، اتم نیتروژن به رنگ آبی پررنگ و اتم کربن به رنگ سبز نمایش داده میشود. برای residue اول اتم نیتروژن و برای residue آخر اتم کربن انتخاب میشود.

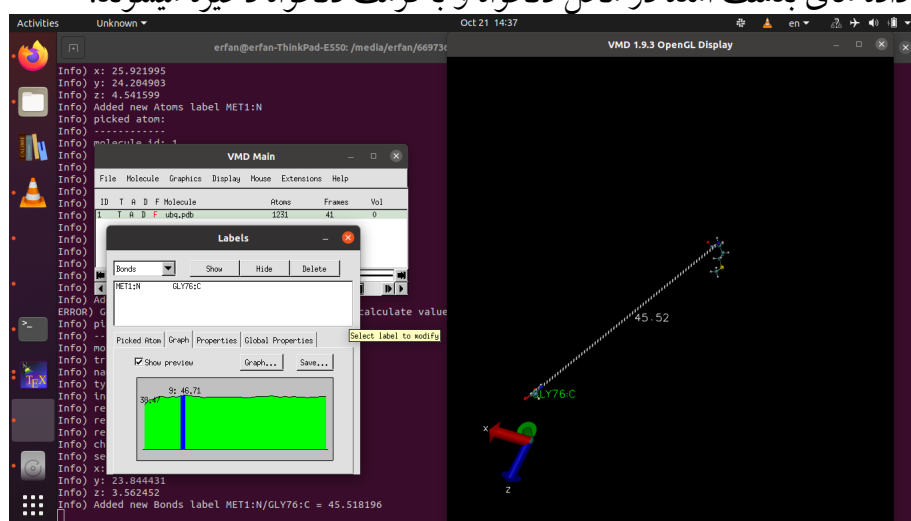
حال برای اندازه گیری فاصله بین این دو اتم از روی تب Mouse گزینه Label و سپس Bond

انتخاب میشود. سپس دو اتم مد نظر را انتخاب کرده و در نهایت در تب Graphics گزینه Labels و در لیست بالا گزینه Bonds انتخاب میشود.

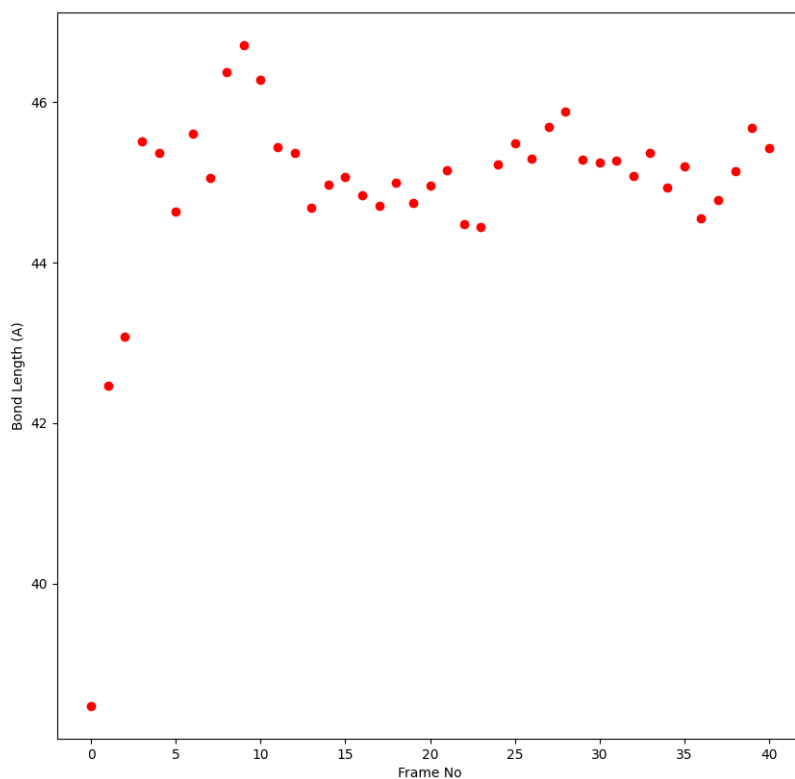


شکل ۱-۷: محاسبه فاصله پیوند بین دو اتم

سپس با انتخاب پیوند و با زدن تیک Show Preview گراف را بدست آورده با کلیک کردن روی گزینه Save داده های بدست آمده در محل دلخواه و با فرمت دلخواه ذخیره میشوند.



شکل ۱-۸: بدست آوردن گراف فاصله

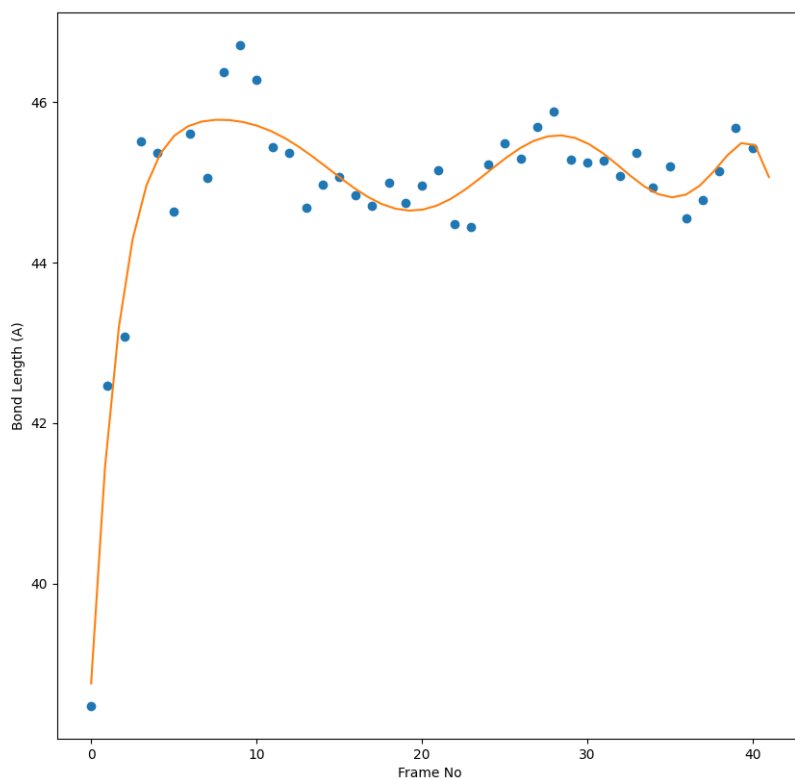


شکل ۱-۹: اندازه پیوند

برای فیت کردن یک چند جمله ای درجه ۸ بر روی این دیتا در پایتون از دستور زیر استفاده شد.

```
plt.figure(figsize = (10,10))
xp = np.linspace(0, 41)
p = np.poly1d(np.polyfit(x, y, 8))
plt.plot(x, y, '.', xp, p(xp), '-')
```

نتیجه بدست آمده در تصویر زیر آمده است.



شکل ۱-۱۰: فیت شدن منحنی چندجمله ای درجه ۸ بر روی داده ها

فرمول منحنی فیت شده در ۱-۱ آمده است.

(۱-۱)

$$-1/22 \cdot 10^{-9} x^8 + 2/0.3 \cdot 10^{-7} x^7 - 1/37 \cdot 10^{-5} x^6 - 0/0.1 x^4 + 0/12 x^3 - 0/94 x^2 + 3/92 x + 38/75$$

۱-۲ محاسبه مدول یانگ

پارامترهای مربوط به پروتئین به صورت زیر است:

$$m = ۸۵۶۴/۸۴۴ amu$$

$$m = ۱/۴۲۲۲ \cdot ۱۰^{-۲۳} kg A = ۱۰۰۰ \text{ \AA}^۲$$

$$t = ۴۰ ps \quad (۲-۱)$$

$$T = ۲۰ ps$$

$$F = ۱۰ pN$$

ابتدا با استفاده از این فرمول به محاسبه ضریب میرایی پروتئین پرداخته میشود.

$$\zeta = \left[1 + \left(\frac{۲\pi}{\ln(y_۱/y_۲)} \right)^۲ \right]^{-۰/۵} \quad (۳-۱)$$

$$\omega_d = \frac{۲\pi}{T} \quad (۴-۱)$$

$$\omega_n = \frac{\omega_d}{\sqrt{1 - \zeta^۲}} \quad (۵-۱)$$

$$۲\zeta\omega_n = \frac{C}{m} \quad (۶-۱)$$

که در آن پارامترهای به این صورت محاسبه میشوند.

$$y_۱ = y_{m۱} - y_{\infty}$$

$$y_۲ = y_{m۲} - y_{\infty} \quad (۷-۱)$$

$$y_{\infty} = \frac{۱}{N} \sum_{i=۲۰}^{۴۱} y_i$$

برای محاسبه مجانب از میانگین تعداد بیست داده دوم استفاده شده است.

$$y_{\infty} = ۴۵/۱۷۱۹ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

$$y_۱ = ۴۵/۷۸۲۲ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

$$y_۲ = ۴۵/۵۸۶۳ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

ضریب میرایی محاسبه شده

$$\zeta = ۰/۰۶۱۴۹$$

$$\omega_d = ۳۱/۴۱ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

$$\omega_n = ۳۱/۴۷ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

$$k = ۱/۴۰ N/m$$

$$y_{\cdot} = ۳۸/۷۵۲۵ \text{ \AA}$$

$$\Delta y = y_{\infty} - y_{\cdot} = ۶/۴۱۹۴ \text{ \AA}$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta y}{y_{\cdot}} = ۰/۱۶۵۶$$

$$\sigma = \frac{F}{A} = ۰/۰۱ \cdot ۱۰^8 N/m^2$$

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = ۶/۰۳۸ MPa$$

فصل ۲

ساختار فایل های ورودی

۱-۲ فایل های PDB

این فایل ها شامل اطلاعاتی مانند نام ترکیب، اورگانیزم، و بافتی که نمونه مربوطه از آن به دست آمده است میشود. دو بخش اصلی این فایل بخش ATM و HETATM است که مربوط به مختصات اتم های پروتئین، آب، یون ها و هرگونه اتم Heterogeneous است که در کریستال یافت شده است.

ATOM	1	N	MET	1	27.340	24.430	2.614	1.00	9.67	1UBQ	71
ATOM	2	CA	MET	1	26.266	25.413	2.842	1.00	10.38	1UBQ	72
ATOM	3	C	MET	1	26.913	26.639	3.531	1.00	9.62	1UBQ	73
ATOM	4	O	MET	1	27.886	26.463	4.263	1.00	9.62	1UBQ	74
ATOM	5	CB	MET	1	25.112	24.880	3.649	1.00	13.77	1UBQ	75

شکل ۱-۲: ساختار فایل PDB

ساختار این فایل به این صورت است که به ترتیب از چپ به راست نوع داده، ID اتم، نام اتم، نام ساختار این فایل به این صورت است که به ترتیب از چپ به راست نوع داده، residue ID، residue پارامترهای مختصات Occupancy، فاکتور دمایی، نام قسمت و شماره خط را شامل میشود.

۲-۲ فایل های PSF

این فایل ها حاوی تمامی اطلاعاتی است که برای اعمال یک میدان نیرو بر روی یک مولکول مورد نیاز خواهد بود. این فایل ها دارای شش قسمت مهم هستند. این قسمت ها شامل: اتم، پیوند، زوایا، دایهدرال ها، impropers و cross term هاست.

مراجع

- [1] B. Alberts. *Molecular Biology of the Cell (page 173, 473)*. Garland Science, 2014.
- [2] J. Berg. *Biochemistry 8th ed.* Freeman and Co, 2015.