دانشگاه صنعتی شریف
دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

کلاس تدریسیار دینامیک مولکولی
تبدیل انرژی

عنوان:

تمرین دوم

نگارش:

محمد عرفان حمدی ــ ۹۹۲۰۹۰۴۱

مدرس:

حسین شایگانی

مهر ۱۴۰۰

فهرست مطالب

۱ محاسبه مدول یانگ پروتئین 1UBQ ۱

۱ـ۱ برازش منحنی ۱

۱ـ۲ محاسبه مدول یانگ ۸

۲ ساختار فایل‌های ورودی ۱۰

۲ـ۱ فایل‌های PDB ۱۰

۲ـ۲ فایل‌های PSF ۱۱

فهرست شکل‌ها

۱ـ۱ وارد کردن مولکول جدید ۲

۱ـ۲ وارد کردن داده‌های مربوط به نیرو ۲

۱ـ۳ ایجاد کردن دو حالت نمایش ۳

۱ـ۴ تغییر حالت نمایش به ۳

۱ـ۵ انتخاب شماره residue برای نمایش دادن ۴

۱ـ۶ تغییر حالت رنگ آمیزی بر اساس نوع عنصر ۴

۱ـ۷ محاسبه فاصله پیوند بین دو اتم ۵

۱ـ۸ بدست آوردن گراف فاصله ۵

۱ـ۹ اندازه پیوند ۶

۱ـ۱۰ فیت شدن منحنی چندجمله‌ای درجه ۸ برروی داده‌ها ۷

۲ـ۱ ساختار فایل PDB ۱۰

فصل ۱

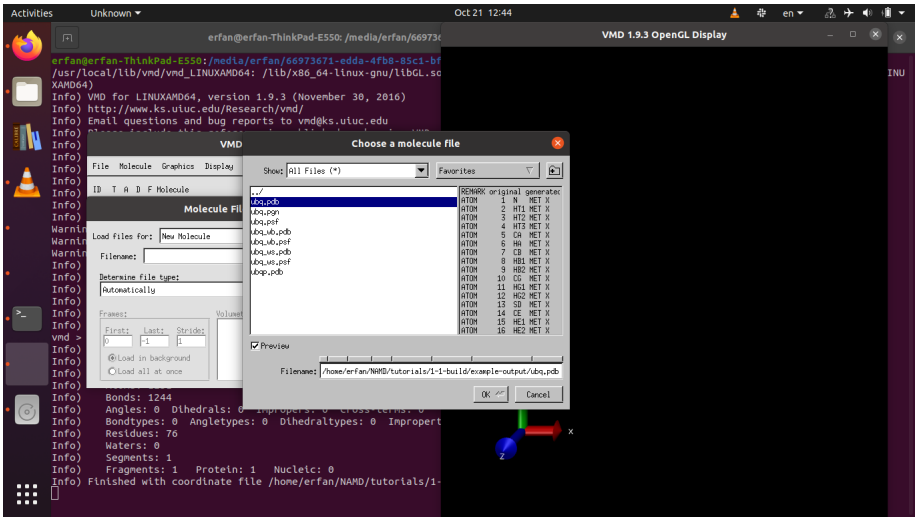
محاسبه مدول یانگ پروتئین 1UBQ

۱ـ۱ برازش منحنی

پس از اینکه نرم افزار VMD را درترمینال 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

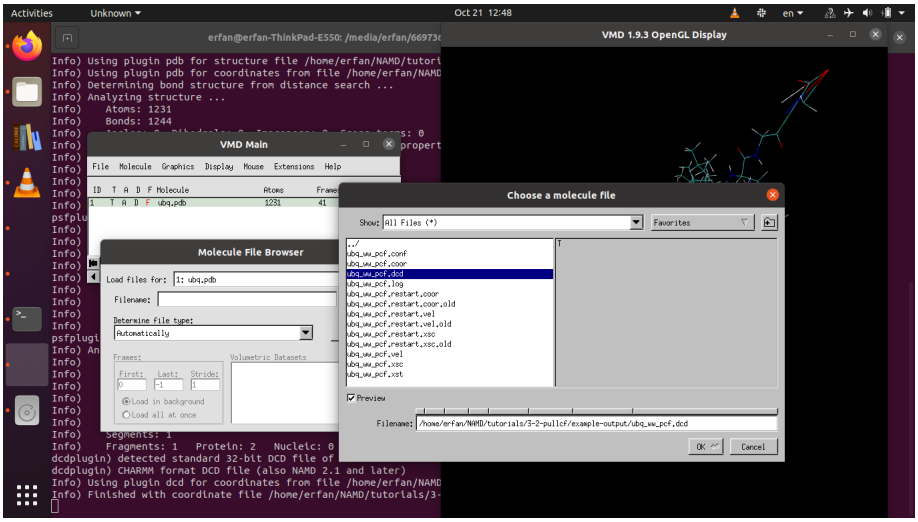
وجود دارد بارگذاری می‌شود.



شکل ۱ــ۱: 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.

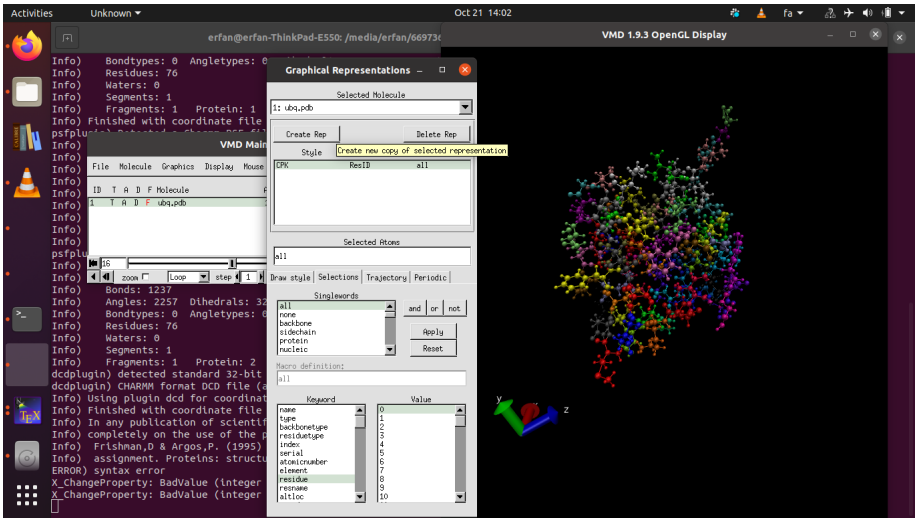
tutorials/3-2-pullcf/example-output/ubq_ww_pcf.dcd



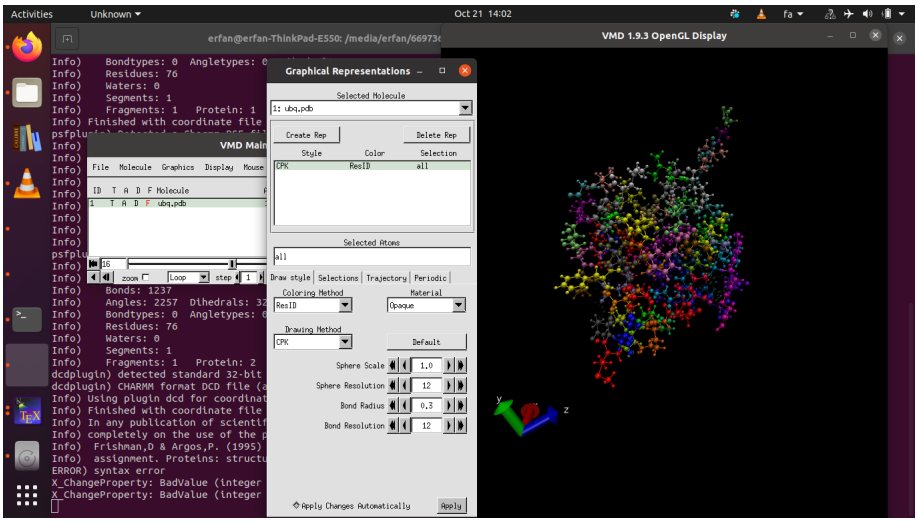
شکل ۱ــ۲: وارد کردن داده‌های مربوط به نیرو

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

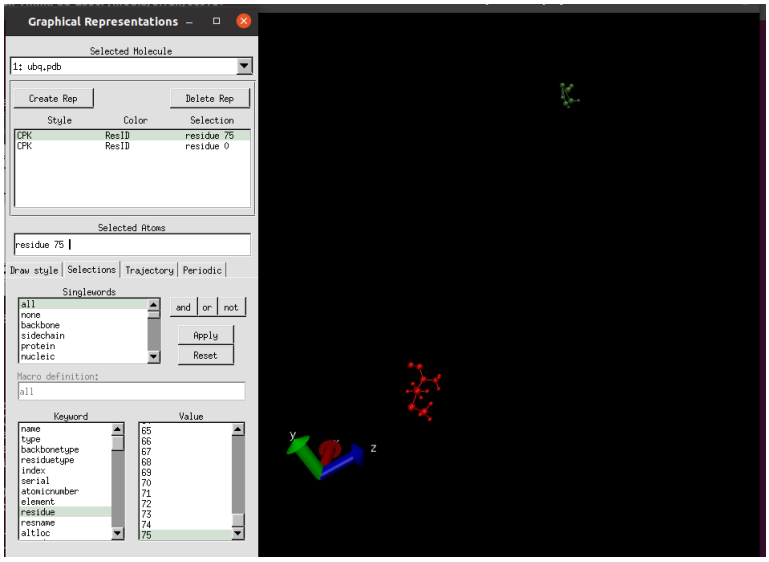


شکل ۱ــ۳: ایجاد کردن دو حالت نمایش



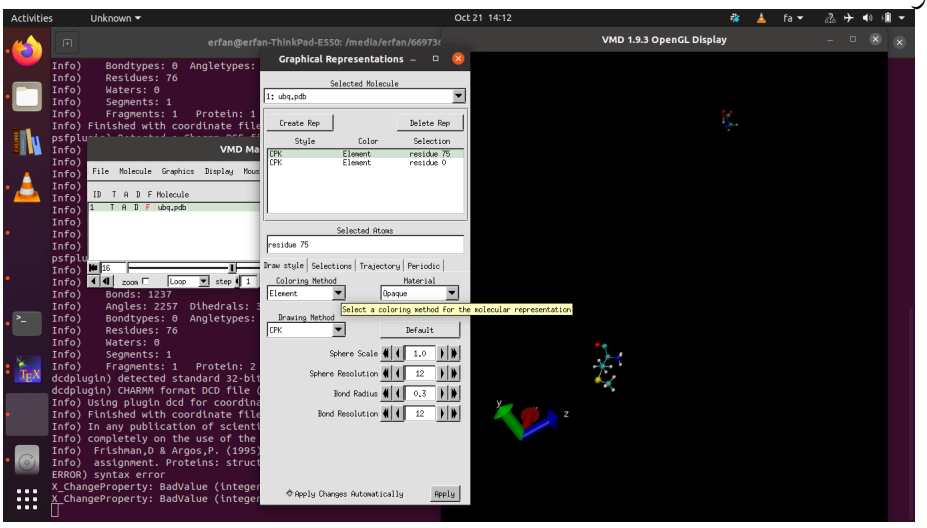
شکل ۱ــ۴: تغییر حالت نمایش به

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 ۱ــ۵: 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 اتم‌های نیتروژن در ابتدا و اتم کربن در انتها به عنوان‌ترمینال‌های شروع و پایان انتخاب شوند.

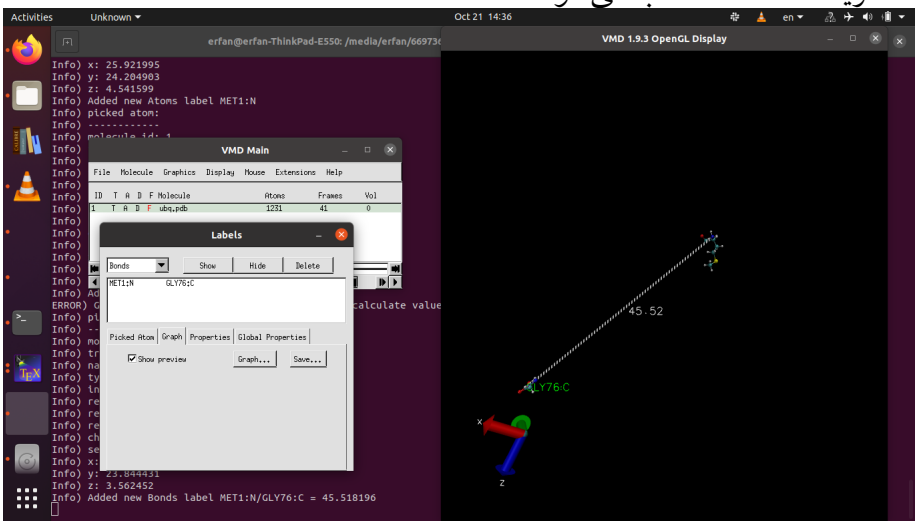


شکل ۱ــ۶: تغییر حالت رنگ آمیزی بر اساس نوع عنصر

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.

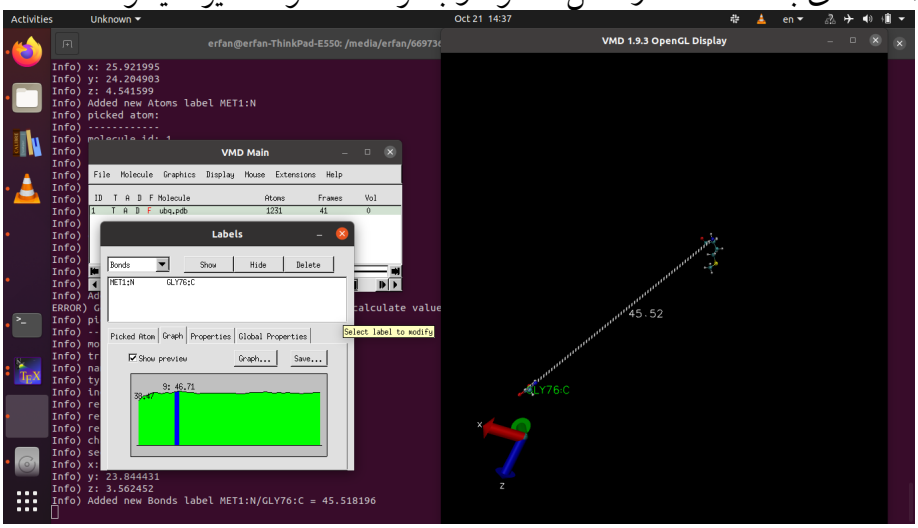
حال برای اندازه گیری فاصله بین این دو اتم از روی تب Mouse گزینه Label و سپس Bond

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.

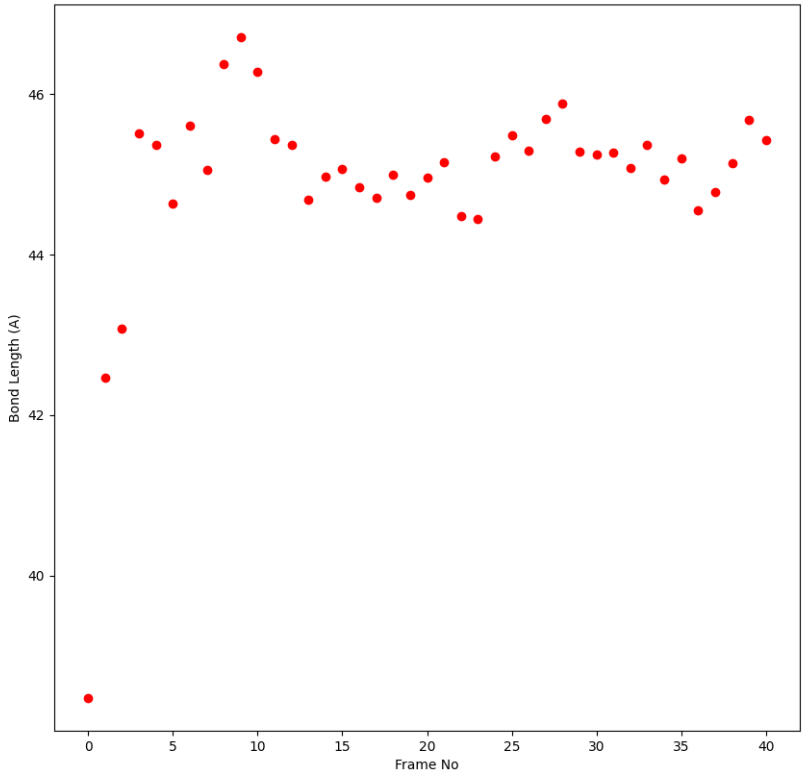


شکل ۱ــ۷: محاسبه فاصله پیوند بین دو اتم

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



شکل ۱ــ۸: بدست آوردن گراف فاصله

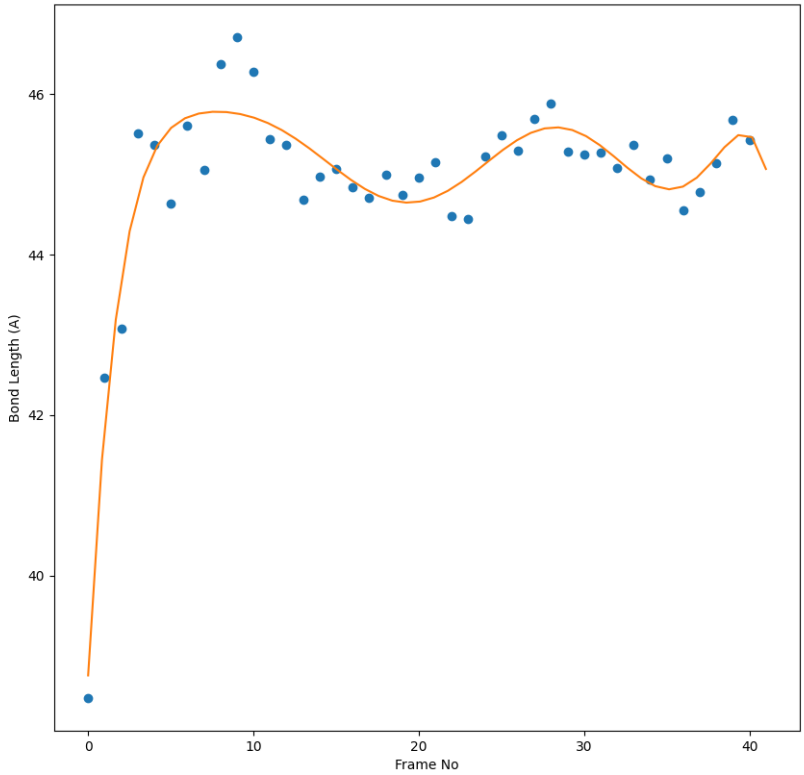


شکل ۱ ــ ۹: اندازه پیوند

برای فیت کردن یک چند جمله‌ای 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 ـ ۱۰: فیت شدن منحنی چندجمله‌ای درجه ۸ برروی داده‌ها

فرمول منحنی فیت شده در ۱ ـ ۱ آمده است.

(۱ ـ ۱)

$$-۱/۲۲۰۱۰^{-۹}x^{۸}+۲/۰۳۰۱۰^{-۷}x^{۷}-۱/۳۷۰۱۰^{-۵}x^{۶}-۰/۰۱x^{۴}+۰/۱۲x^{۳}-۰/۹۴x^{۲}+۳/۹۲x+۳۸/۷۵$$

۱ـ۲ محاسبه مدول یانگ

پارامترهای مربوط به پروتئین به صورت زیر است:

$$\begin{aligned} m &= ۸۵۶۴/۸۴۴amu \\ m &= ۱/۴۲۲۲ \cdot ۱۰^{-۲۳}kgA = ۱۰۰۰\mathring{A}^{۲} \\ t &= ۴۰ps \\ T &= ۲۰ps \\ F &= ۱۰pN \end{aligned} \tag{۱ـ۲}$$

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

$$\zeta = \left[۱ + \left(\frac{۲\pi}{ln(y_۱/y_۲)} \right)^{۲} \right]^{-۰/۵} \tag{۱ـ۳}$$

$$\omega_d = \frac{۲\pi}{T} \tag{۱ـ۴}$$

$$\omega_n = \frac{\omega_d}{\sqrt{۱ - \zeta^{۲}}} \tag{۱ـ۵}$$

$$۲\zeta\omega_n = \frac{C}{m} \tag{۱ـ۶}$$

که در آن پارامترهای به این صورت محاسبه میشوند.

$$\begin{aligned} y_۱ &= y_{m۱} - y_\infty \\ y_۲ &= y_{m۲} - y_\infty \\ y_\infty &= \frac{۱}{N} \sum_{i=۲۰}^{۴۱} y_i \end{aligned} \tag{۱ـ۷}$$

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

$$\begin{aligned} y_\infty &= ۴۵/۱۷۱۹ \cdot ۱۰^{۱۰} \\ y_۱ &= ۴۵/۷۸۲۲ \cdot ۱۰^{۱۰} \\ y_۲ &= ۴۵/۵۸۶۳ \cdot ۱۰^{۱۰} \end{aligned}$$

ضریب میرایی محاسبه شده

$$\zeta = ۰/۰۶۱۴۹$$

$$\omega_d = ۳۱/۴۱ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

$$\omega_n = ۳۱/۴۷ \cdot ۱۰^{۱۰}$$

$$k = ۱/۴۰ N/m$$

$$y_۰ = ۳۸/۷۵۲۵ \mathring{A}$$

$$\Delta y = y_\infty - y_۰ = ۶/۴۱۹۴ \mathring{A}$$

$$\varepsilon = \frac{\Delta y}{y_۰} = ۰/۱۶۵۶$$

$$\sigma = \frac{F}{A} = ۰/۰۱ \cdot ۱۰^{۸} N/m^{۲}$$

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

فصل ۲

ساختار فایل‌های ورودی

۲ـ۱ فایل‌های PDB

این فایل‌ها شامل اطلاعاتی مانند نام‌ترکیب، اورگانیسم، 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 اتم‌های پروتئین، آب، یون‌ها 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 ۲ـ۱: ساختار فایل PDB

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

۲ـ۲ فایل‌های PSF

این فایل‌ها حاوی تمامی اطلاعاتی است که برای اعمال یک میدان نیرو بر روی یک مولکول مورد نیاز خواهد بود. این فایل‌ها دارای شش قسمت مهم هستند. این قسمت‌ها شامل: اتم، پیوند، زوایا، دایهدرال‌ها، impropers و cross termهاست.

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.