

24-5118

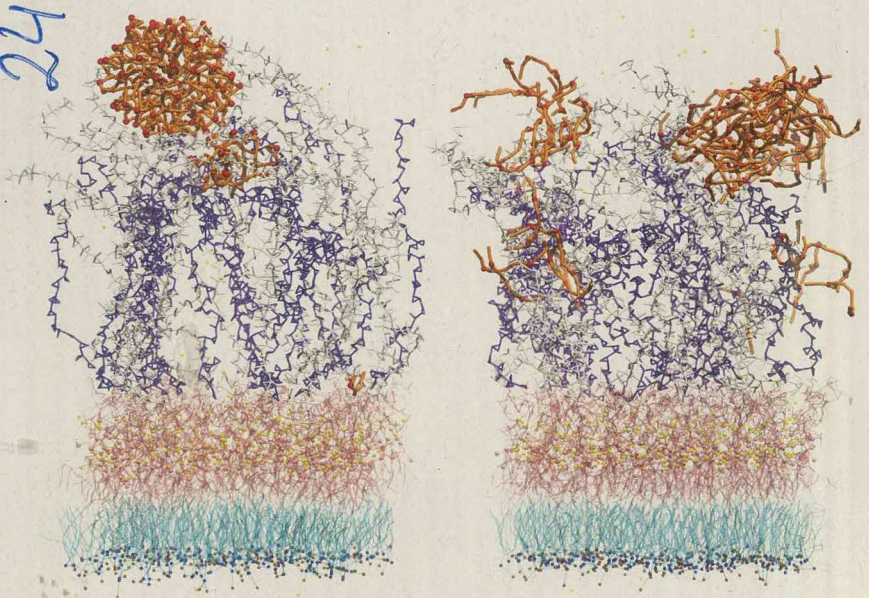
НА ДУХИ НЕ ВЫДАЕТСЯ

И.Б. Коваленко, М.Г. Страховская,  
Е.Г. Холина, А.Б. Рубин

**МЕТОДЫ  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ  
БИОЛОГИЧЕСКИХ МЕМБРАН**

*Учебное пособие*

24-05118



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

Биологический факультет

*И.Б. Коваленко, М.Г. Страховская,  
Е.Г. Холина, А.Б. Рубин*

МЕТОДЫ  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ  
БИОЛОГИЧЕСКИХ МЕМБРАН

*Учебное пособие*

Товарищество научных изданий КМК  
Москва ❖ 2024

УДК [[577.352:579.8]:004.94](078.5)

ББК 28.471с51я73-1

М54

И.Б. Коваленко, М.Г. Страховская, Е.Г. Холина, А.Б. Рубин. Методы молекулярно-динамического моделирования биологических мембран. Учебное пособие. Москва: Товарищество научных изданий КМК. 2024. 98 с.

В учебном пособии к спецкурсу «Теория и практика молекулярно-динамических расчетов» изложены современные подходы цифрового биодизайна к созданию реалистичных молекулярных моделей плазматических мембран грамположительных и грамотрицательных бактерий, а также наружной мембраны клеточной стенки грамотрицательных бактерий. Пособие направлено на освоение теории и практики создания компьютерных молекулярных моделей бактериальных мембран методами крупнозернистого моделирования. Рассматриваются примеры использования компьютерных моделей при изучении барьерных функций бактериальных мембран, а также в исследованиях молекулярных механизмов взаимодействия и переноса через мембраны молекул биоцидов.

Предназначено для студентов МГУ, обучающихся по образовательным программам «Биоинженерия и биотехнология. Биофизика» по специальности биофизика, а также может быть рекомендовано студентам, обучающимся по направлению подготовки «Фундаментальная и прикладная биология», при выполнении ряда задач специализированных практикумов, ВКР и НИР в области молекулярного моделирования биосистем.

*Рекомендовано к опубликованию решением Ученого и Учебно-методического советов биологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова*

#### **Рецензенты:**

*М.Г. Хренова, д.ф.-м.н., профессор РАН, зав. НИЛ квантовой химии и молекулярного моделирования химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова*

*М.А. Пантелеев, д.ф.-м.н., профессор РАН, член-корреспондент РАН, директор ФГБУН Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН*

© Коллектив авторов, текст, иллюстрации, 2024

© Товарищество научных изданий КМК, издание, 2024

ISBN 978-5-907747-56-2

# Содержание

1. Введение .....	5
2. Моделирование бактериальных мембран: обзор существующих моделей .....	15
3. Крупнозернистое силовое поле Martini .....	24
4. Практические рекомендации и примеры создания моделей бактериальных мембран при помощи сервиса CHARMM-GUI .....	28
5. Примеры создания крупнозернистых молекулярных моделей антимикробных соединений .....	44
6. Практические рекомендации к проведению молекулярно-динамических расчетов для исследования взаимодействия антимикробных веществ с бактериальными мембранами .....	53
7. Примеры исследования взаимодействия антимикробных веществ с бактериальными мембранами методами крупнозернистой молекулярной динамики .....	54
8. Введение в теорию метода зонтичной выборки для изучения транслокации антимикробных веществ через бактериальные мембраны .....	79
9. Практические рекомендации к проведению молекулярно-динамических расчетов зонтичной выборки ....	81
10. Примеры использования метода зонтичной выборки для исследования взаимодействия антимикробных веществ с бактериальными мембранами.....	82

<i>11. Термины и определения .....</i>	<i>92</i>
<i>12. Задание для самостоятельной работы.....</i>	<i>93</i>
<i>13. Список литературы.....</i>	<i>95</i>