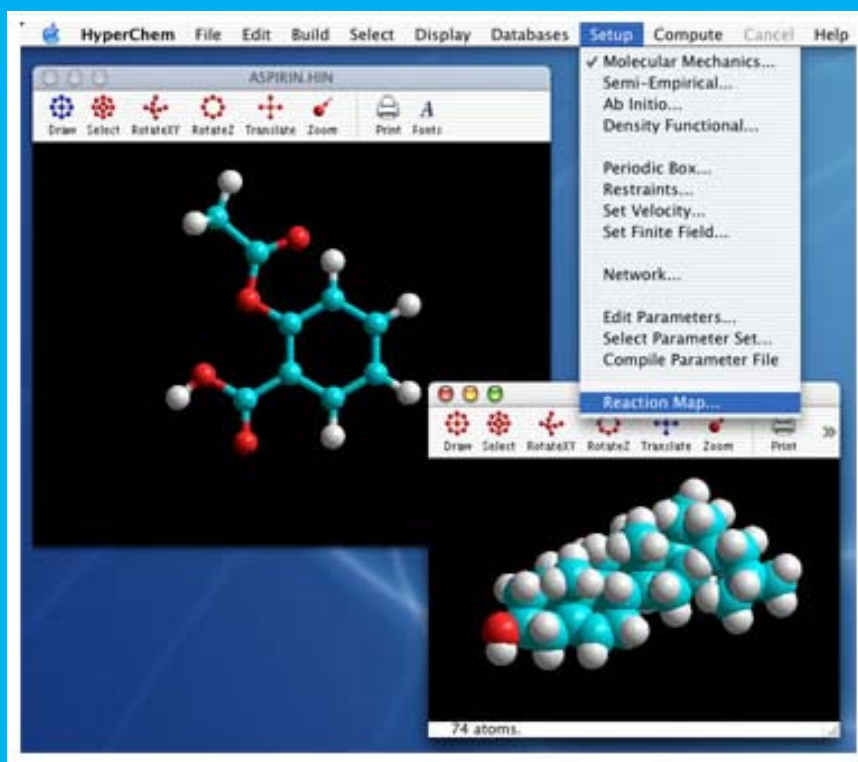


İ.N.ƏLİYEVƏ, L.İ.VƏLİYEVƏ

***MOLEKULYAR DİNAMİKA ÜSULU
VƏ ONUN ZÜLAL VƏ PEPTİDLƏRİN
MODELLƏŞDİRİLMƏSİNDƏ
İSTİFADƏSİ***



BAKI-2007

İ.N. ƏLİYEVƏ, L.İ.VƏLİYEVƏ

**MOLEKULAR DİNAMİKA ÜSULU
VƏ ONUN ZÜLAL VƏ PEPTİDLƏRİN
MODELLƏŞDİRİLMƏSİNDƏ
İSTİFADƏSİ**

Ali məktəb tələbələri üçün dərs vəsaiti

Azərbaycan Respublikası Təhsil Nazirliyinin
02 may 2007-ci il tarixli 406 sayılı əmrinə əsasən
çap edilməsi tövsiyyə olunmuşdur

Elmi redaktor: fizika-riyaziyyat elmləri doktoru,
professor N.M.QOCAYEV

Rəyçilər: fizika-riyaziyyat elmləri namizədi,
dosent N.S.Nəbiyev

kimya elmləri namizədi,
dosent Ş.S.Nəsibov

Bu kitab universitetlərin biolojiya, kimya və fizika fakültələrində bioloji fəal molekulların nəzəri hesablama üsulları ilə fəza quruluşlarını öyrənən bakalavr, magistr və aspirantları üçün nəzərdə tutulmuşdur.

*İ.N.Əliyeva
L.İ.Vəliyeva*

MÜƏLLİFLƏRDƏN

ÖN SÖZ

Molekulyar dinamika üsulu «proqnozlaşdırın» kompüter üsullarından biridir. Bu üsulla bir çox hissəciklər sisteminin hərəkəti modelləşdirilir və onların keyfiyyət xassələri nəzərdən keçirilir. Nə vaxt ki, çox hissəcikli sistemin halını müəyyən etmək çətinlik tədir, o vaxt molekulyar dinamika üsulundan istifadə etmək məqsədəuyğun sayılır. Molekulyar dinamika üsulundan bioloji makromolekulların, mayelərin, qazların və digər molekulyar sistemlərin quruluşlarının nəzəri hesablanması uğurla istifadə edilir.

Biomühəndisliyin, molekulyar texnologiyaların sürətli inkişafı biomolekulyar quruluşların, funksional nanoquruluşların və bir çox dərmanların proyektlənməndə molekulyar dinamika üsulları toplusundan istifadə edilməsini ön plana çəkdi – onu daha da aktual etdi. Hal-hazırda bu üsul intensiv surətdə inkişaf edərək materallar və polimerlər fizikası, mineralogiya və astrofizika kimi elm sahələrində də öz tətbiqini tapmışdır.

Son illər Bakı Dövlət Universitetinin fizika fakültəsinin bir çox tələbə və dissertantları molekulyar modelləşməni mənimsəyirlər. Bu dərs vəsaiti sadə peptid və zülal molekulları misalında bu üsulu öyrətmək məqsədi ilə yazılmışdır. Vəsaitin birinci hissəsində molekulyar dinamika üsullarının əsasını təşkil edən fiziki təsəvvürlər şərh edilir, lazımi məlumat və düsturlar verilir. İkinci – praktiki hissədə isə Huper.chem proqramlar toplusu ilə işləmə metodikası öyrənilməklə yanaşı, hesablamalardan alınan nəticələrin izahı verilir.

MÜNDƏRİCAT

	Səh.
ÖN SÖZ	3
NƏZƏRİ HİSSƏ	
I. Molekulyar dinamika iisulu	4
1.1. Hərəkət trayektoriyasının hesablanması	4
1.2. Molekulyar dinamikada hesablamaları tezləşdirən amillər	11
1.3. Molekulyar dinamikada mühitin nəzərə alınması....	13
1.4. Periodik sərhəd şərtləri	14
1.5. Termostatlar	15
PRAKTİK HİSSƏ	
HyperChem proqramına daxil olma	24
HyperChem proqramına uyğun pəncərənin menyuları	27
HyperChem-də siçandan istifadə qaydaları.....	28
HyperChem-da klaviaturadan istifadə qaydaları	29
HyperChem proqramının köməkliyi ilə ayrı-ayrı atomların təsvir olunması	30
HyperChem proqramında qeyd olunmuş atom va molekullarla işləmək yolları	32
HyperChem-lə molekulun yığılması	34
HyperChem proqramında molekulun su Mühitinə salınması	39
HyperChem-də quruluşun parametrlərinin təyini.....	51
İŞ №1. HyperChem proqramında molekulun molekulyar mexanika va yanmempirik kvant- Kimyəvi üsullarla hesablanması	66
İŞ №2. HyperChem proqramı ilə molekulun molekulyar dinamikasının öyrənilməsi	75
İSTİFADƏ EDİLƏN ƏDƏBİYYAT	81