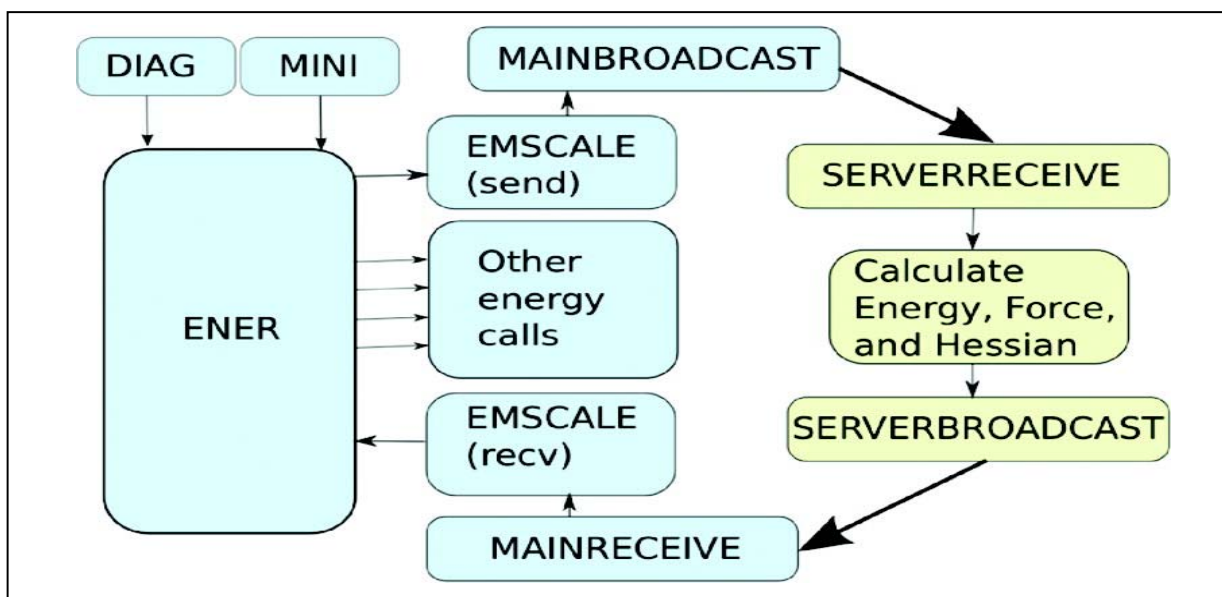


# NARAVOSLOVJE

## Področje: 1.07 – Računsko intenzivne metode in aplikacije

**Dosežek 1:** MSCALE: splošna shema za večskalno modeliranje Vir: *J. Chem. Theory Comput.*, 2011, 7 (4), 1208-1219 (IF= 5,215, physics, atomic, molecular & chemical ; 1/32, A”).



Avtorji s Kemijskega inštituta (Milan Hodošček) in NIH so razvili razširitev večskalnega pristopa za obravnavo različnih biokemijskih problemov, imenovanega MSCALE, ki so ga vgradili v splošno uporabljan program za molekularne simulacije CHARMM. Modul, imenovan MSCALE, omogoča posplošitev seštevalne in odštevalne večskalne sheme pri QM/MM simulacijah ter tudi omogoča vključitev klasičnih potencialnih funkcij in večskalnih simulacijskih pristopov, kot so grobo zrnato modeliranje, model elastične mreže, Gaussianov mrežni model ter kombinacijo naštetih. MSCALE shema ima tudi to prednost, da je enostavna za implementacijo. Ta novi pristop je vgrajen v perturbacijske pristope za izračune prostih energij in Hessianove metode ter uporablja periodičnost in simetrijo sistema, kar omogoča natančen izračun tlaka. Uporabnost novega pristopa so pokazali na štirih primerih: (1) odštevalna in standardna QM/MM metoda, (2) izračun proste energije za primer več potencialnih funkcij, (3) vključitev tega modula v programa za molekularno modeliranje, AMBER modul SANDER in TINKER, kar omogoča uporabo njihovih potencialnih funkcij pri simulacijah s CHARMM-om in (4) dvojna uporaba, to je večskalno in vseatomsko uporabo pristopov analize po normalnih načinih nihanja. S tem pristopom so razvili tako nova matematična orodja za simulacije. Ta članek je bil v drugem četrtletju 2011 med desetimi najbolj branimi članki v reviji *J. Chem. Theory Comput.*