

УДК 352.74

МОДЕЛЮВАННЯ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ САХАРОЗИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Торяник Д.О., канд. фіз.-мат. наук

Державний біотехнологічний університет

Проведено комп'ютерне моделювання водних розчинів сахарози різних концентрацій. Отримано дані щодо молекулярної рухливості води у розчинах.

Сахароза $C_{12}H_{22}O_{11}$ (рис. 1) є найбільш поширеним вуглеводом, який входить до складу майже всіх рослинних культур та широко застосовується у харчовій промисловості. Це дисахарид, який належить до групи олігосахаридів та складається з двох моносахаридів – α -глюкози та β -фруктози. Велика кількість груп ОН призводить до активної взаємодії молекули сахарози з молекулами води та утворенню великої кількості водневих зв'язків.

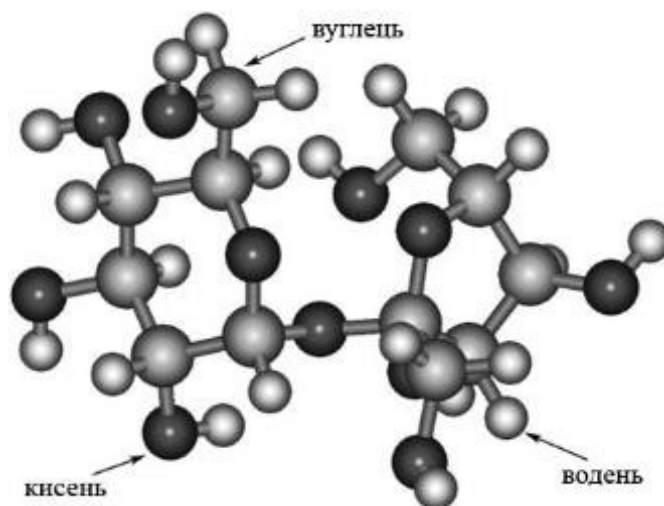


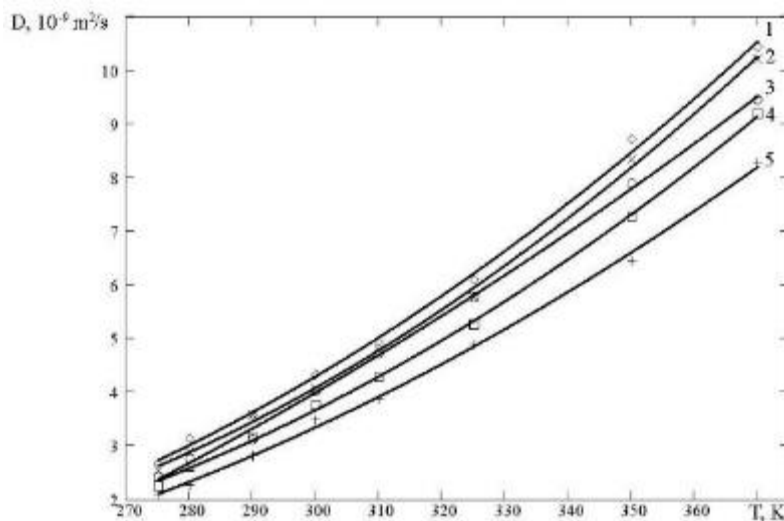
Рисунок 1 – Просторова модель молекули сахарози.

Водні розчини сахарози різної концентрації досліджувались методом молекулярної динаміки. Для розрахунків та обробки результатів використовувалась програма GROMACS. Конфігурація молекули сахарози отримана за використанням програми PRODRG і адаптована для використання програмою GROMACS.

Проведено моделювання систем, що відповідають 5%, 10% і 15% водним розчинам сахарози. Розчину сахарози з концентрацією 5% відповідає кубічна комірка з довжиною ребра 4,51 нм, яка містить 8 молекул сахарози та 2901 молекулу води. Розчину сахарози з концентрацією 10% відповідає кубічна комірка з довжиною ребра 3,58 нм, яка містить 8 молекул сахарози та 1371 молекулу води. 15% концентрації розчину сахарози відповідає комірці з ребрами 3,15 нм, 2,93 нм і 3,25 нм, яка містить 8 молекул сахарози та 860 молекул води. Чисельний експеримент проводився за температур 275 К, 280 К, 290 К, 300 К, 310 К, 325 К, 350 К і 370 К та за умови нормального тиску. Також для порівняння

результатів було проведено моделювання чистої води за таких самих температур. Для цього було взято кубічну комірку з ребром 3,13 нм, яка містила 1022 молекули води.

Вихідні конфігурації, які відповідають системам, що було змодельовано, створено засобами які є в програмі GROMACS. Попередньо системи було приведено у рівноважний стан мінімізацією енергії за допомогою короткого молекулярно-динамічного розрахунку. Повне моделювання методом молекулярної динаміки проводилося з шагом 0,001 пікосекунди. Координати атомів системи записувались в файл через 500 шагів, тобто кожні 0,5 пс. Розрахунковий час при моделюванні розчинів за кожної температури становив 5000 пс.



Концентрації розчину сахарози:

1 – чиста вода, 2 – 5%, 3 – 10%, 4 – 15%, 5 – 30%.

Рисунок 2 – Залежність коефіцієнта самодифузії від температури.

Під час обробки результатів було отримано залежності середнього квадрату зміщення центру мас молекул води від часу. Базуючись на цих даних було розраховано коефіцієнти самодифузії води та побудовано температурні залежності для розчинів досліджених концентрацій (рис. 2). Порівняння за однакових температур для різних концентрацій розчинів показує, що при невеликих концентраціях сахарози наявність молекул цукру мало впливає на рухомість молекул води. Наприклад, за температури 300 К коефіцієнти самодифузії молекул води в розчинах з концентраціями сахарози 5%, 10% і 15% менше ніж у чистій воді відповідно на $0,267 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$, $0,312 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$ і $0,581 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$.

Більше інформації про зв'язування води молекулами сахарози дає кількість водневих зв'язків, що утворює сахароза з молекулами води, а також структура гідратної оболонки молекул сахарози та кількість молекул води, з яких вона складається. Цей розрахунок можна виконати на основі файлів координат, які отримано під час комп'ютерного експерименту. Розраховано, що приблизно через 200 пікосекунд кількість молекул гідратної оболонки починає коливатись

навколо деякого середнього значення, яке майже не залежить від концентрації розчину. Аналогічну картину дає розрахунок кількості водневих зв'язків між молекулами сахарози та води.

Таким чином проведене моделювання водних розчинів сахарози методом молекулярної динаміки дозволило детально проаналізувати структуру розчинів сахарози та оцінити вплив концентрації сахарози та температури на молекулярну рухомість.

Список використаних джерел:

1. Erik Lindahl, Berk Hess and David van der Spoel. GROMACS 3.0: A package for molecular simulation and trajectory analysis // J. Mol. Mod. 2001. № 7. P.306-317.
2. Schuettelkopf A.W. and van Aalten D.M.F. PRODRG – a tool for high-throughput crystallography of protein-ligand complexes // Acta Crystallogr. – 2004. – D60. – P.1355-1363.