

Д.О. Горяник, канд. фіз.-мат. наук, доц. (ХДУХТ, Харків)

ДОСЛІДЖЕННЯ ВОДЯНИХ РОЗЧИНІВ ГЛЮКОЗИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Роль води в живій природі та житті неможливо переоцінити, а її властивості надзвичайні та дуже цікаві. Дослідженню води різними методами присвячена велика кількість робіт і інтерес до цієї речовини не спадає. Сучасний погляд на структуру води полягає в тому, що існує єдина трьохвимірна сітка, яка утворена молекулами, з'єднаними водневими зв'язками. Представляє інтерес, яким чином в цю сітку "вписуються" молекули іншої речовини та як вони впливають на рухомість молекул води. Ця робота присвячена дослідженню водних розчинів глюкози.

Вуглеводи мають велике значення в харчуванні людини як основне джерело енергії для забезпечення життєдіяльності організму. Глюкоза (α -D-глюкопіранозил- β -D-фруктофуранозид) є одним з найбільш поширених вуглеводів, яка входить до складу багатьох харчових продуктів. Вона міститься у живих організмах як у вільному вигляді так і у вигляді ефірів фосфорної кислоти. Її залишок входить до складу багатьох олігосахаридів та полісахаридів. В природі зустрічається тільки D-глюкоза, яка представлена двома аномерами (рис. 1). У водному розчині встановлюється динамічна рівновага між α - та β -глюкозами склад яких становить приблизно 36 та 64%.

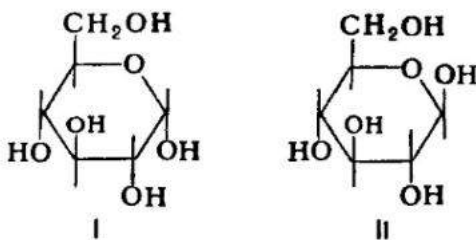


Рисунок – Структурні формули глюкози (I - α -D-глюкопіраноза, II - β -D-глюкопіраноза)

Наявність великої кількості груп OH свідчить про активну взаємодію глюкози з молекулами води. Не підлягає сумніву, що детальне вивчення механізму взаємодії глюкози з водою дозволить пояснити властивості деяких харчових систем набути в присутності глюкози та надасть можливість керувати цими властивостями.

Сучасний розвиток обчислювальної техніки дозволяє проводити чисельне моделювання систем, що складаються з великої кількості молекул. Метод молекулярної динаміки є одним з найбільш перспективних методів дослідження води та водних систем, який дозволяє визначити вплив різних факторів, таких як температура, тиск та ін., на поведінку об'єкта, що моделюється. Крім того він дає можливість отримати координати всіх молекул системи в будь-який час експерименту.

Водні розчини сахарози різної концентрації моделювались методом молекулярної динаміки. Для цього використовувалась програма GROMACS. Конфігурація молекули глюкози отримана за використанням програми PRODRG і адаптована для використання програмою GROMACS. Початкові конфігурації розчинів глюкози отримані засобами, що передбачені у програмі GROMACS.

Моделювались системи, що відповідають 5, 10, 15 і 30% водним розчинам глюкози. Розчину глюкози концентрації 5% відповідають 27 молекул глюкози та 393 молекули води, 10% – 27 молекул глюкози та 372 молекули води, 15% – 27 молекул глюкози та 352 молекули води, 20% – 27 молекул глюкози та 331 молекула води, 30% – 27 молекул глюкози та 290 молекул води. Чисельний експеримент проводився за температур 275; 280; 290; 300; 310; 325; 350 і 370 K за умови нормального тиску.

Вихідні конфігурації, які відповідають системам, що було досліджено, створено засобами що існують 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 зазначених вище концентрацій за кожної температури становив 5000 пс.

Таким чином, отримані файли траєкторій, що містять координати всіх атомів системи в будь-який час експерименту. Обробка цих файлів дозволить детально проаналізувати структуру розчинів глюкози та оцінити вплив концентрації глюкози та температури на молекулярну рухомість. Також аналіз файлів траєкторій дасть можливість розрахувати кількість водневих зв'язків, що утворюють молекули глюкози з молекулами води та простежити за поведінкою будь-якої молекули впродовж часу комп'ютерного експерименту.