

ارائه مدل دانه درشت تترامر کیتوزان بر اساس میدان نیروی مارتینی

بشری مرادی^{۱*}، علی مقاری^۲، سید مهدی واعظ علایی.

۱- کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه تهران (*boshra.moradi.61@ut.ac.ir*)

۲- استاد، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه تهران (*maghari@ut.ac.ir*)

۳- دانشیار، فیزیک، دانشکده فیزیک و دانشگاه تهران (*smvaez@ut.ac.ir*)

واژگان کلیدی: شبیه سازی دینامیک مولکولی، میدان نیروی مارتینی، مدل دانه درشت، کیتوزان

۱- مقدمه

به منظور بررسی دانه درشت کیتوزان، مدلی را بر مبنای میدان نیروی مارتینی برای ساختار تترامر کیتوزان ارائه کرده ایم. در این مقاله به صورت بسیار مختصر تنها به ساختار غیر پروتونه و خنثی پرداخته شده است.

۲- مدل سازی

۲-۱ شبیه سازی تمام اتمی

شبیه سازی تمام اتمی با استفاده از میدان نیروی OPLS-AA در بسته ی گرومکس ۲۰۲۱.۷ انجام شد. تترامر کیتوزان در مرکز جعبه ای مکعبی با ابعاد ۴nm قرار داده شد و ۲۱۳۸ مولکول آب از نوع TIP۳P به آن اضافه شد. شبیه سازی ساختار تمام اتمی در ۱۰۰ns با گام زمانی ۲ fs انجام شد.

۲-۲ چگونگی دانه بندی و نوشتن پرونجای توپولوژی

با دانه بندی کیتوزان بر اساس قواعد موجود از ساختار ۹۱ اتمی به ساختار ۱۶ دانه ای رسیدیم (مرینک ۲۰۰۷، لویز ۲۰۰۹، پریول ۲۰۱۳، سوزا ۲۰۲۱) (شکل-۱). و پرونجای توپولوژی اولیه نوشته شد. برای حدس اولیه ی پارامترهای پیوندی از توابع توزیع پیوندها، زوایا و زوایای دووجهی که از آنالیز شبیه سازی تمام اتمی برای مراکز ژئومتری دانه ها بدست آمده بود، بهره بردیم.

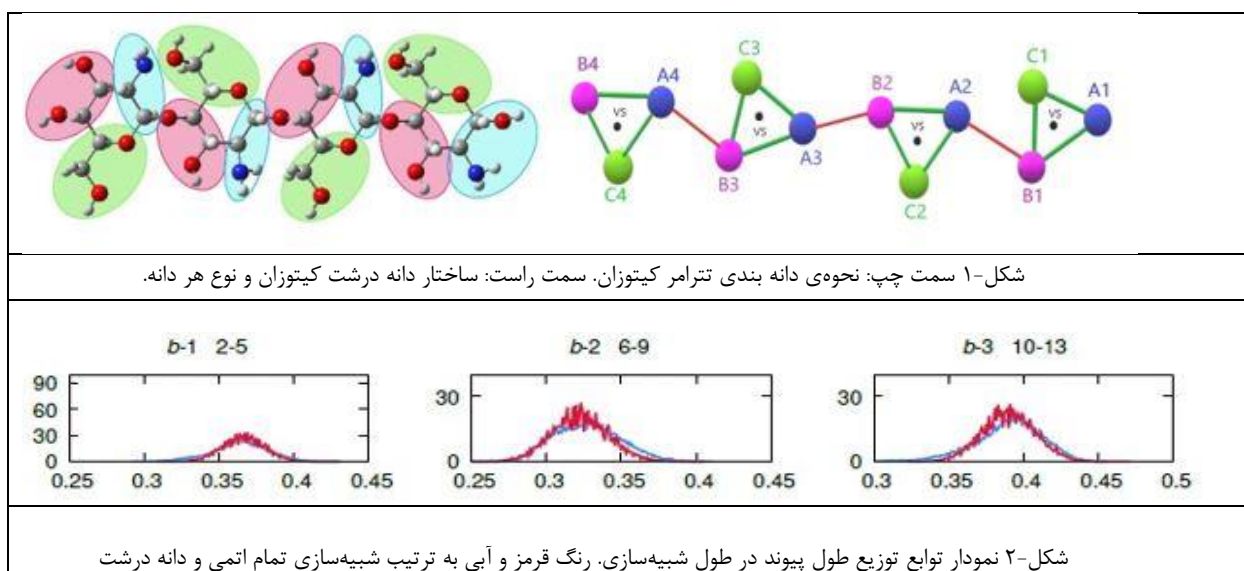
۲-۳ شبیه سازی دانه درشت

با داشتن پرونجای توپولوژی اولیه، ساختار دانه درشت در جعبه ای مکعبی با ابعاد ۵.۴nm و ۳۰۵ دانه ی آب از نوع W قرار گرفت و مانند شبیه سازی تمام اتمی مراحل حداقل رسانی انرژی، تعادل رسانی و انجام شبیه سازی انجام گرفت و توابع توزیع پیوندها،

زوایا و زوایای دوجوهری برای ساختار دانه درشت بدست آمد و نمودارهای مربوطه در کنار نمودارهای معادل حاصل از شبیه‌سازی تمام اتمی رسم شد و از میزان انطباق این نمودارها در مرحله‌ی بعد پروتئولژی اصلاح گردید و مجدداً شبیه‌سازی روی ساختار دانه درشت انجام گرفت و این روند تا حصول بیشترین انطباق بین نتایج حاصل از شبیه‌سازی تمام اتمی و دانه‌درشت انجام گرفت.

۳- نتیجه‌گیری

نمودارهای شکل-۲، توابع توزیع طول پیوند بین دانه‌ها (رنگ قرمز) تطابق بسیار خوبی با توزیع تمام اتمی (رنگ آبی) دارد. که حاکی از انتخاب مناسب پارامترهای میدان نیرو است. لازم به ذکر است، سه نمودار فوق مربوط به سه پیوند بین ساختارهای مثلی در مدل می باشد و این تنها ۳ نمودار از ۱۵ نمودار توابع توزیع پیوند است. برای زوایا و زوایای دوجوهری نیز این نمودارها رسم شده اند. همچنین سطح قابل دسترس حلال در مدل دانه‌درشت و ساختار تمام اتمی تطابق بسیار خوبی را نشان دادند.



منابع و مراجع

- [۱] Marrink, Siewert J, Risselada, H Jelger, Yefimov, Serge, Tieleman, D Peter, and De Vries, Alex H. The martini force field: coarse grained model for biomolecular simulations. The journal of physical chemistry B, ۱۱۱(۲۷):۷۸۱۲-۷۸۲۴, ۲۰۰۷.
- [۲] López, Cesar A, Rzepiela, Andrzej J, de Vries, Alex H, Dijkhuizen, Lubbert, Hünenberger, Philippe H, and Marrink, Siewert J. Martini coarse-grained force field: extension to carbohydrates. Journal of Chemical Theory and Computation, ۵(۱۲):۳۱۹۵-۳۲۱۰, ۲۰۰۹.
- [۳] Periole, Xavier and Marrink, Siewert-Jan. The martini coarse-grained force field. Biomolecular simulations: Methods and protocols, pp. ۵۳۳-۵۶۵, ۲۰۱۳.
- [۴] Souza, Paulo CT, Alessandri, Riccardo, Barnoud, Jonathan, Thallmair, Sebastian, Faustino, Ignacio, Grünewald, Fabian, Patmanidis, Ilias, Abdizadeh, Haleh, Bruininks, Bart MH, Wassenaar, Tsjerk A, et al. Martini ۲: a general purpose force field for coarse-grained molecular dynamics. Nature methods, ۱۸(۴):۳۸۲-۳۸۸, ۲۰۲۱.