

สุภาภรณ์ ดอกไม้ศรีจันทร์ : การศึกษาการไฮเดรตของไอออนขั้วคู่อะลานีนโดยวิธีทฤษฎี

(A THEORETICAL STUDY ON HYDRATION OF ALANINE ZWITTERION)

อาจารย์ที่ปรึกษา : ศาสตราจารย์ ดร.กฤษณะ สาคริก, 99 หน้า. ISBN 974-533-452-9

งานวิจัยนี้ศึกษาโครงสร้างและพลังงานของโครงข่ายพันธะไฮโดรเจน (hydrogen bond network) ของโมเลกุลน้ำที่หมู่ฟังก์ชัน  $\text{NH}_3^+$  และ  $\text{COO}^-$  ของไอออนขั้วคู่อะลานีน (alanine zwitterion) สองโครงรูปโดยใช้วิธีทฤษฎี การศึกษาเริ่มจากการสร้างศักย์ระหว่างโมเลกุลเพื่อใช้อธิบายอันตรกิริยาระหว่างไอออนขั้วคู่อะลานีนและน้ำ จากนั้นใช้วิธีการจำลองโมเลกุลพลวัต (molecular dynamics simulations) เพื่อศึกษาสมบัติของไอออนขั้วคู่อะลานีนในสารละลายน้ำ การวิเคราะห์โครงสร้างสามมิติและภูมิภาคพลังงานศักย์เฉลี่ยของโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนของโมเลกุลน้ำทำโดยใช้แผนภาพการแจกแจงความน่าจะเป็น (probability distribution map) แบบต่างๆ

ผลจากการคำนวณโดยวิธีการจำลองโมเลกุลพลวัตแสดงว่า โครงรูปไอออนขั้วคู่อะลานีนที่มีโครงกระดูกแบนราบ (Alaz) มีเสถียรภาพการไฮเดรตโดยรวมสูงกว่าโครงรูปที่ระนาบ  $\text{COO}^-$  ทำมุม  $90^\circ$  กับระนาบ  $\text{NC}^{\alpha}\text{C}$  (Alaz-R) อย่างไรก็ตาม พบว่าน้ำสามารถเข้าถึงโครงรูป Alaz-R ได้ดีกว่า การคำนวณยังแสดงด้วยว่า โมเลกุลน้ำสร้างโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนรอบ Alaz และ Alaz-R ได้อย่างเป็นระเบียบโดยเฉพาะที่หมู่  $\text{NH}_3^+$  ทั้งนี้ โครงสร้างและพลังงานของโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนของโมเลกุลน้ำที่หมู่ฟังก์ชัน  $\text{NH}_3^+$  และ  $\text{COO}^-$  มีลักษณะแตกต่างกัน อันตรกิริยาระหว่างตัวถูกละลายและตัวทำละลายที่หมู่  $\text{NH}_3^+$  ของ Alaz และ Alaz-R แข็งแรงกว่าที่หมู่  $\text{COO}^-$  ผลการคำนวณโดยวิธีการจำลองโมเลกุลพลวัตแสดงว่า โมเลกุลน้ำใช้เวลาอยู่ที่หมู่  $\text{NH}_3^+$  นานกว่าที่หมู่  $\text{COO}^-$  และโครงสร้างการไฮเดรตที่หมู่  $\text{NH}_3^+$  ของ Alaz บางส่วนซ้อนเหลื่อมกับที่หมู่  $\text{COO}^-$  ในขณะที่โครงสร้างการไฮเดรตที่หมู่ฟังก์ชันทั้งสองของ Alaz-R ค่อนข้างเป็นอิสระต่อกัน และโมเลกุลน้ำที่สร้างพันธะกับหมู่  $\text{NH}_3^+$  บางโมเลกุลสามารถเคลื่อนที่มาสร้างพันธะกับหมู่  $\text{COO}^-$  ได้ ผลการคำนวณพบว่า หมู่  $\text{NH}_3^+$  และ  $\text{COO}^-$  มีแนวโน้มไม่สร้างพันธะไฮโดรเจนระหว่างกัน ในน้ำ

ผลการวิเคราะห์ภูมิภาคพลังงานศักย์เฉลี่ยของโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนของโมเลกุลน้ำสรุปได้ว่า แม้ลักษณะของภูมิภาคพลังงานศักย์เฉลี่ยของโครงข่ายพันธะไฮโดรเจนของโมเลกุลน้ำค่อนข้างไม่สม่ำเสมอ แต่ภูมิภาคดังกล่าวสามารถอธิบายลักษณะจำเพาะและพฤติกรรมเชิงพลวัตของโมเลกุลน้ำได้โดยเฉพาะที่หมู่ฟังก์ชันของตัวถูกละลาย ผลการคำนวณโดยวิธีการจำลองโมเลกุลพลวัตกรณีสารละลายน้ำเสนอว่า หากต้องการข้อมูลเกี่ยวกับการ



SUPAPORN DOKMAISRIJAN : A THEORETICAL STUDY ON  
HYDRATION OF ALANINE ZWITTERION. THESIS ADVISOR :  
PROF. KRITSANA SAGARIK, Ph.D. 99 PP. ISBN 974-533-452-9

ALANINE ZWITTERION/AMINO ACID/HYDROGEN BOND/T-MODEL/  
HYDRATION/MD SIMULATIONS

This research focused on the study of the structures and energetic of hydrogen bond (H-bond) networks of water at the  $\text{NH}_3^+$  and  $\text{COO}^-$  functional groups of two forms of alanine zwitterion using theoretical methods. The study started with the construction of intermolecular potentials between the alanine zwitterions and water, followed by molecular dynamics (MD) simulations of the aqueous solutions. The three-dimensional structures and the average potential energy landscapes of the H-bond networks of water were analyzed and visualized using various probability distribution (PD) maps.

The MD results revealed that the conformation with planar skeleton (Alaz) possesses larger overall stabilization by hydration, whereas the conformation with the  $\text{COO}^-$  plane being  $90^\circ$  with respect to the  $\text{NC}^\alpha\text{C}$  backbone (Alaz-R) seems to be more accessible by water. The PD maps also showed that water forms well-defined H-bond networks around Alaz and Alaz-R, especially at the  $\text{NH}_3^+$  group. The structures and energetic of the H-bond networks of water at the  $\text{NH}_3^+$  and  $\text{COO}^-$  functional groups are quite different. The solute-solvent interaction at the  $\text{NH}_3^+$  group of Alaz as well as Alaz-R is considerably stronger than at the  $\text{COO}^-$  group. The MD results revealed that water molecules spend longer time at the  $\text{NH}_3^+$  group than at the  $\text{COO}^-$  group.

The MD results also showed that some parts of the hydration structures at the  $\text{NH}_3^+$  group of Alaz overlap with some of that at the  $\text{COO}^-$  group; whereas the hydration structures at two functional groups of Alaz-R are quite independent. Some water molecules binding at the  $\text{NH}_3^+$  group can translate to bind with the  $\text{COO}^-$  group. There was no direct evidence for the intramolecular H-bond formation between the  $\text{NH}_3^+$  and  $\text{COO}^-$  groups.

The analysis of the average potential energy landscapes of the H-bond networks of water showed that, although their shapes are highly irregular, they can help characterize the dynamic behavior of water molecules especially at the functional groups of the solutes. The MD results led to the conclusion that complete information on molecular hydration can be obtained only when explicit water molecules, together with their hydration dynamics at the hydration sites, are considered in the model calculations.

School of Chemistry

Academic Year 2005

Student's Signature S. Dokmaimijan

Advisor's Signature H. Sepanik

Co-advisor's Signature A. Tonyasir