

## Исследование хиральных свойств модельных водных систем

О. Н. Градобоева\*

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,  
кафедра молекулярных процессов и экстремальных состояний вещества  
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Статья поступила 25.04.2016; Подписана в печать 05.05.2016)

Данная статья посвящена исследованию хиральности конфигураций водных кластеров с примесными ахиральными ионами  $K^+$  и  $Na^+$  и с примесными хиральными биологическими молекулами L-, D-валина и L-, D-глицерозы. Водные системы с ионами были получены с помощью метода Монте-Карло, а водные оболочки биологических молекул с помощью программы Avogadro алгоритмом Conjugate Gradients. Было выявлено, что при добавлении ахиральных примесей в модельную водную систему не меняется распределения 50/50 количества правых и левых конфигураций, а добавление хиральной молекулы D-валина приводит к преобладанию левых конфигураций в выборке.

PACS: : 61.20.Ja

УДК: 539.2

Ключевые слова: компьютерное моделирование, хиральность, водные системы.

Любой объект окружающей нас действительности может либо обладать элементами симметрии, либо нет. Его свойство симметрии оказывает влияние на проявляемые им различные физические, химические и биологические свойства. Данная работа посвящена исследованию изменения одного из вида симметрии — хиральности. Хиральность — это свойство объекта не совмещаться со своим зеркальным образом. Хиральные изомеры отличаются по биологическим, химическим свойствам и такому физическому свойству, как вращение плоскости поляризации плоскополяризованного света. Вследствие этого, учет хиральности придают большое значение при создании наноматериалов [1]. При разработке новых лекарственных препаратов учет хиральности так же крайне важен. Поскольку энантиомер (зеркальный образ) лекарства может не обладать фармацевтическим свойством или даже оказаться ядом [2]. Кроме того, проводятся обширные исследования причин гомохиральности живой природы. До сих пор не известны причины того, что аминокислоты в основном имеют L-конфигурацию, а сахара — D-конфигурацию [3]. Поскольку основным растворителем в природе является вода и все биологические молекулы находятся в водном окружении, то становится актуальным поиск ответов на следующие вопросы: влияет ли водная среда на хиральность примесных молекул и способны ли они влиять на хиральность среды? Если влияние существует, то насколько далеко оно распространяется по водной среде?

Для поиска ответов на данные вопросы были проведены исследования хиральных свойств водных кластеров в модельных водных системах. Объектами исследования являлись водные кластеры без примесей и с ахиральными примесями, такими как ионы  $K^+$  и  $Na^+$ , а так же водные оболочки хиральных биологически

значимых молекул, таких как L-, D-глицероза и L-, D-валин. Анализ хиральных свойств водных систем проводился с помощью метода, описанного в [4]. Выборки водных кластеров без примесей и с примесными ионами были получены методом Монте-Карло с процедурой Метрополиса. Для получения выборок водных оболочек валина и глицерозы, биологические молекулы окружались слоем молекул  $H_2O$  заданной толщины в программе Solvate. Толщина слоя менялась от 4 до  $14\text{Å}$  с шагом в  $2\text{Å}$ . После чего водные системы оптимизировались алгоритмом Conjugate Gradients с помощью потенциала MMFF94 в программе Avogadro до  $dE < 10^{-5}$  кДж/моль.

Было выявлено, что водные кластеры  $(H_2O)_n$  при  $n = 4 \div 8$  и при температурах 1 и 300 К не имеют выраженного направления закрученности, т. е. количество правых и левых конфигураций в выборках одинаково, но при этом при увеличении  $n$  наблюдается рост количества хиральных конфигураций в выборке.

При добавлении в водные кластеры примесного иона  $K^+$  или  $Na^+$  (рис. 1) сохраняется равновесное распределение правых и левых конфигураций в выборках. При 1 К различие в количестве правых и левых конфигураций в выборке для кластеров с различными примесными ионами исчезает, начиная с 9 молекул воды, входящих в кластер (рис. 1а). А при 300 К различие исчезает уже при 8 молекулах воды, входящих в кластер (рис. 1б).

Для водных оболочек L-, D-глицерозы и L-валина наблюдалось равновесное распределение правых и левых конфигураций в выборках для всех значений толщины водного слоя. А для водного слоя D-валина толщиной  $4\text{Å}$  в выборке было выявлено преобладание левых конфигураций над правыми (рис. 2). При увеличении толщины водного слоя распределение правых и левых конфигураций становилось равновесным.

\*E-mail: ongradoboeva@mail.ru

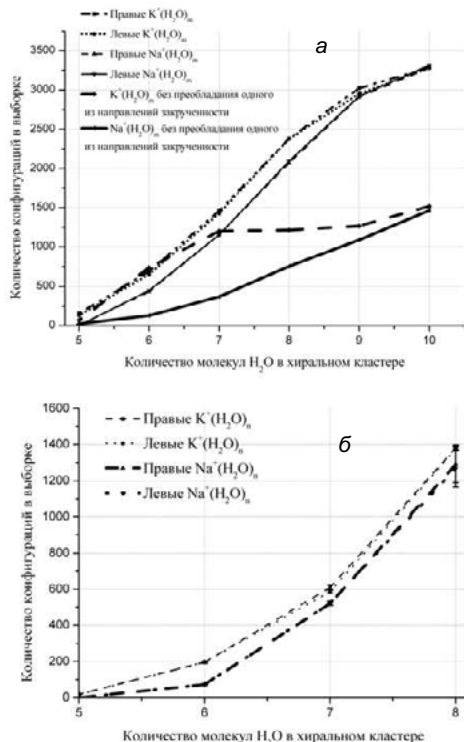


Рис. 1: Зависимость количества правых левых конфигураций в выборке от количества молекул, входящих в кластер при 1 К (а) и при 300 К (б).

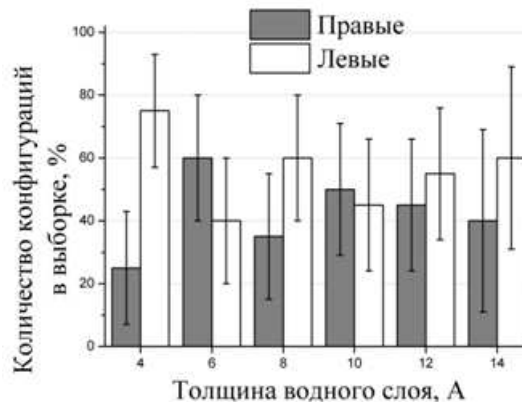


Рис. 2: Зависимость количества правых и левых конфигураций водных оболочек D-валина в выборке от толщины водного слоя

Из вышеизложенного следует вывод, что добавление в водную систему различных по хиральности примесей может влиять на ее хиральные свойства. Кроме того, на хиральные свойства системы оказывает влияние и изменение ее температуры.

- [1] Захарченко А.А., Петров Б.К., Борمونтов Е.Н. ВЕСТНИК Воронежского государственного технического университета. **5**, № 8. С. 20. (2009).  
 [2] Василенко И.А., Лебедева М.В., Листров В.А. Разработка и регистрация лекарственных средств. №1(10). С. 92. (2015).

- [3] Твердислов В.А., Сидорова А.Э., Яковенко Л.В. Биофизическая экология. С. 277. (Москва, 2012).  
 [4] Хахалин А.В., Градобоева О.Н. Журнал структурной химии. **57**, № 5. С. 971. (2016).

## The Study of Chiral Properties of Model Water Systems

O. N. Gradoboeva

Department of Molecular Processes and Extreme States of Matter, Faculty of Physics,  
 M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia  
 E-mail: ongradoboeva@mail.ru.

This article is devoted to the study of chiral properties of water configurations with achiral ions K<sup>+</sup> and Na<sup>+</sup> and with chiral biological molecules: L-, D-valin and L-, D-glycerate. Water system with ions was obtained using the Monte-Carlo method, a water shell of biological molecules was obtained using the Avogadro algorithm Conjugate Gradients. It was revealed that addition of achiral impurities in a model water system does not change the 50/50 distribution of the number of right and left water configurations, and the addition of chiral molecules D-valine leads to the predominance of the left configurations in the sample.

PACS: 61.20.Ja.

Keywords: computer simulations, chirality, the water system.

Received 25.04.2016.

### Сведения об авторе

Градобоева Ольга Николаевна — науч. сотрудник; тел.: (495) 939-40-34, e-mail: ongradoboeva@mail.ru.