

Vandens įtakos L-treonino fragmentacijai tyrimas taikant ab initio metodus

A study on the influence of water on the L-threonine fragmentation

Laura Baliulytė¹, Jelena Tamulienė²

¹Vilniaus Universitetas, Gyvybės mokslų centras Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 7, 10223 Vilnius, Lietuva

²Vilniaus Universitetas, Nacionalinis fizinių ir technologijos mokslų centras Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10222 Vilnius, Lietuva

baliulyte.laura@gmail.com

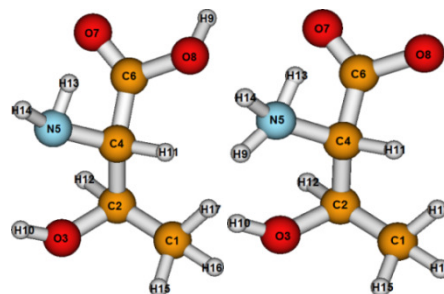
Visus organizmus nuolat veikia jonizuojančioji spinduliuotė, kurią skleidžia radionuklidai esantys dirvožemyje, ore, maiste ir vandenyje. Jonizuojančioji spinduliuotė taip pat naudojama ir medicininiais tikslais. Pavyzdžiui, rentgeno spinduliai naudojami įvertinti dantų būklę ir diagnozuoti kaulų lūžius, o gama spinduliai naudojami vėžio gydymui. Rentgeno ir gama spinduliams veikiant organizmus, susidaro lėtieji (antriniai) elektronai dėl biomolekulių pakitimų. Susidarę lėtieji elektronai sukelia amino rūgščių (pvz. L-treonino) fragmentaciją [1].

Yra žinoma, jog vanduo sudaro didžiausią dalį ląstelės svorio – ~ 70%. Be to, dauguma biocheminių reakcijų ir biofizikinių procesų vyksta vandenyje. Taip pat vanduo veikia amino rūgščių struktūrą [2]. Deja, yra labai mažai teorinių ir/ar eksperimentinių duomenų apie amino rūgščių fragmentaciją vykstančią vandenyje. Tad mūsų tyrimų tikslas – nustatyti vandens įtaką L-treonino fragmentacijai.

Stabiliausių L-treonino konformerų struktūrų vakuume bei įskaitant vandens įtaką (1 pav.) nustatymui ir teigiamų fragmentų susidarymui reikalingų energijų apskaičiavimui buvo naudotas tankio funkcionalo teorijos (DFT) B3LYP kvantinės chemijos metodas su koreliacinių trivalenčių (cc-pVTZ) bazių artiniu. Vandens įtakai įvertinti naudotas poliarizuojamas aplinkos modelis (PCM). Tyrimai atlikti naudojant Gaussian 03 Rev D.01 programą instaliuotą VU MIF Skaitmeninių tyrimų ir skaičiavimų centre esančiame superkompiuteryje.

Nustatyta, jog vienodos molinės masės ir vienodos cheminės sudėties fragmentų atsiradimo energija nustatyta įskaitant vandens įtaką ir be jos skiriasi, t.y. fragmentų atsiradimo energija nustatyta neįskaičius vandens įtakos yra mažesnė. Pavyzdžiui, labiausiai tikėtino teigiamo fragmento $C_2H_3NO^+$ ($m=57$ a.m.v.) susidarymui reikalinga energija pateikta žemiau (1 lentelė).

Remiantis gautais tyrimo rezultatais galime teigti, kad L-treonino fragmentacijos procesams dėl lėtų elektronų poveikio vykti vandenyje reikės daugiau energijos nei vakuume ar ore, t.y. vanduo L-treonino fragmentacijos procesus turėtų lėtinti.



1 pav. Vieno iš stabiliausių L-treonino konformerų geometrinė struktūra nustatyta neįskaičius (kairėje) ir įskaičius vandens įtaką (dešinėje).

1 lentelė. Apskaičiuota energija, reikalinga tikėtinausio fragmento susidarymui, tyrimus atlikus neįskaičius ir įskaičius vandens įtaką.

Fragmentas	Energija, reikalinga fragmento susidarymui, eV	
	L-treoninas neįskaičius vandens įtakos	L-treoninas įskaičius vandens įtaką
$C_2H_3NO^+$ ($m=57$ a.m.v.)	9.98	10.87

Reikšminiai žodžiai: L-treoninas, fragmentacija, vandens įtaka.

Padėka

Autorės dėkoja Informacinių technologijų atviros prieigos centrui už galimybę naudotis HPC ištekliais.

Literatūra

- [1] E.J. Hall, A.J. Graccia, *Radiobiology for the radiologist*, edited by L. McAllister, 6th edn. (Lippincott Williams&Wilkins, USA, 2006).
- [2] B. Alberts, D. Bray, K. Hopkin, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter, *Essential Cell Biology*, edited by M. Morales, 4th edn. (Garland Science, Taylor & Francis Group, USA, 2014).