ซอลเวชันของบีตา-ดี-กลูโคซามีนในน้ำโดยวิธีมอนติคาร์โล

นาย คัชรินทร์ ศิริวงศ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาเคมี ภาควิชาเคมี
คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2543

ISBN 974-346-119-1

SOLVATION OF β-D-GLUCOSAMINE IN WATER BY MONTE CARLO METHOD

Mr. Khatcharin Siriwong

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science in Chemistry
Department of Chemistry
Faculty of Science
Chulalongkorn University
Academic Year 2000

ISBN 974-346-119-1

Thesis Title	Solvation of β-D-Glucosamine in Water by Monte Carlo Method
By	Mr. Khatcharin Siriwong
Department	Chemistry
Thesis Advisor	Associate Professor Supot Hannongbua, Ph.D.

Accepted by Faculty of Science, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirement for the Master's Degree

..... Dean of Faculty of Science

(Associate Professor Wanchai Phothiphichitr, Ph.D.)

Thesis Committee

..... Chairman

(Associate Professor Sirirat Kokpol, Ph.D.)

..... Thesis Advisor

(Associate Professor Supot Hannongbua, Ph.D.)

..... Member

(Associate Professor Vudhichai Parasuk, Ph.D.)

..... Member

(Mongkol Sukwattanasinitt, Ph.D.)

คัชรินทร์ ศิริวงศ์ : ซอลเวชันของบีตา-ดี-กลูโคซามีนในน้ำโดยวิธีมอนติคาร์โล (SOLVATION OF β-D-GLUCOSAMINE IN WATER BY MONTE CARLO METHOD) อาจารย์ที่ปรึกษา : รศ. ดร. สุพจน์ หารหนองบัว, 121 หน้า. ISBN 974-346-119-1.

ได้ทำการศึกษาหาโครงสร้างของสารละลายกลูโคซามีนที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียสโดยวิธีมอนติ คาร์โลตามแบบของเมโทรโปลิส ระบบที่ศึกษาประกอบด้วยอนุภาคทั้งหมด 202 อนุภาค ได้แก่ กลูโคซามีน 1 โมเลกุลซึ่งวางอยู่ตรงกลางของกล่องลูกบาศก์ และน้ำ 201 โมเลกุล ค่าความหนาแน่นของน้ำจากการทดลองที่นำมาใช้มีค่า 1 กรัมต่อลูกบาศก์เซนติเมตร ความยาวของกล่องลูกบาศก์ซึ่งมีคุณสมบัติพีริออดิกมีค่าเท่ากับ 18.26 อังสตรอม ในการศึกษานี้ได้พัฒนาฟังก์ชันศักย์เพื่อแทนแรงกระทำระหว่างกลูโคซามีน-น้ำจากการคำนวณโดยวิธีดีแซดพี*แอบ อินิชิโอ* ส่วนฟังก์ชันศักย์ที่แทนแรงกระทำระหว่างน้ำ-น้ำได้เลือกใช้ฟังก์ชันเอ็มซีวาย ผลการศึษาพบว่าชั้นซอลเวชันแรกปรากฏที่ระยะ 4.6 อังสตรอม ห่างจากจุดศูนย์กลางของกลูโคซามีนซึ่งประกอบด้วยน้ำ 7 โมเลกุล ซึ่งพบว่าน้ำ 1 โมเลกุลอยู่ที่ระนาบของลิแกนด์ ในขณะที่อีก 2 และ 4 โมเลกุลอยู่ที่ระยะ 2 – 4 อังสตรอม เหนือและใต้ระนาบของลิแกนด์ตามลำดับ ในจำนวนน้ำทั้ง 7 โมเลกุล พบว่ามีเพียง 1 โมเลกุล ที่เกิดพันธะไฮโดรเจนแบบตรงกับอะตอมออกซิเจนที่อยู่ในวงของกลูโคซามีน นอกจากนี้ยังพบชั้นซอลเวชันที่สองซึ่งประกอบด้วยน้ำ 19 โมเลกุล อย่างชัดเจน

ภาควิชา ....เคมี.... ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา ....เคมี.... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา ....2543.... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

4172237523 : MAJOR CHEMISTRY

KHATCHARIN SIRIWONG : SOLVATION OF β-D-GLUCOSAMINE IN WATER BY MONTE CARLO METHOD. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. SUPOT HANNONGBUA, Ph.D. 121 pp. ISBN 974-346-119-1.

The solvation structure of glucosamine in aqueous solution at 25 ^{o}C has been investigated using the Metropolis Monte Carlo scheme. The system contains 202 rigid particles, including one glucosamine molecule, which fixed at the center of the cube, and 201 water molecules. An experiment density of 1 g.cm^{-3} of water was used, a periodic side length of 18.26 Å was yielded. A glucosamine-water potential function has been newly developed based on DZP *ab initio* calculations, while the MCY potential function was employed to describe water-water interactions. The first solvation shell appears at 4.6 Å from the center of glucosamine with the coordination numbers of 7 water molecules. The results indicate clearly that 1 water molecule lies in the ligand's plane while 2 and 4 water molecules are about 2 – 4 Å above and below the plane, respectively. Among the 7 water molecules, only that binding to ring oxygen atom displays linear H – bond. In addition, second solvation shell with contains 19 water molecules has been also clearly detected.

ภาควิชา เคมี ..... ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา เคมี ..... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2543 ..... ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

ACKNOWLEDGEMENTS

This thesis was completely finished with the excellent suggestions from my advisor, Associate Professor Dr. Supot Hannongbua. I therefore would like to express my sincerest gratitude for giving me his guiding, advising, understanding and encouraging. I am very obliged to Associate Professor Dr. Sirirat Kokpol, Associate Professor Dr. Vudhichai Parasuk and Dr. Mongkol Sukwattanasinitt for their substantial advice as thesis committee.

I also would like to gratefully acknowledge financial support from the Shell Centenary Scholarship Fund and the generous supply of computer time by the Austrian-Thai Centre for Computer Assisted Chemical Education and Research, Department of Chemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University, and the National Electronic and Computer Technology Center, Bangkok.

My absolute acknowledgement is dedicated to my parents, brothers and sisters for their understanding and encouragement throughout the entire study.

CONTENTS

Pages

Pages

LIST OF FIGURES

Figures Pages

Figures Pages

Figures Pages

LIST OF TABLES

Tables Pages