

Molekulių dinamikos skaičiavimai nestandartiniams kompleksams

Molecular Dynamics Simulations for Non-standard Complexes

Mindaugas Macernis¹, Leonas Valkunas^{1,2}, Renata Karpicz², Darius Abramavicius¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

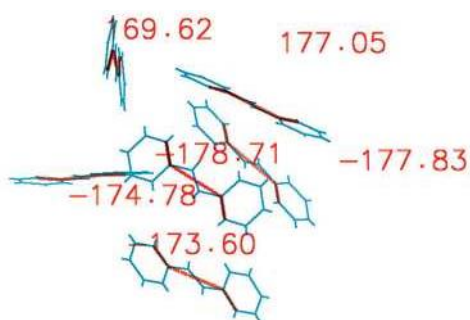
²Fizinių ir technologijos mokslų centras, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Organinės molekulės tirpaluose arba kristalinėse struktūrose gaunamų iš tirpalų gali suformuoti netipines struktūras, turinčias kitokias savybes nei galima tikėtis. Tipinė molekulių dinamika (MD) sunkiai gali prognozuoti tokių struktūrų elgseną, kuri yra reikalinga tolesniems kvantmechaniniams (pvz. tankio funkcionalo teorija - DFT) skaičiavimams. Tad būtina nagrinėti galimas molekulių dinamikos metodikas. Šiame darbe pasirinkti galimi kompleksai iš stilbeno [1-2] ir karotinoidų [3] molekulių, kurie nagrinėti patikslintomis molekulių dinamikos metodikomis, o gauti rezultatai toliau analizuoti DFT metodikomis.

Trans-stilbenų spinduliavimo sugerties ir fluorescencijos spektrų kinetikos tyrimai rodo priklausomybę nuo koncentracijos polistirene [2]. Dalį eksperimentinių duomenų gali paaiškinti dimerizacijos efektai [1]. Visgi, detalesniam supratimui reikalinga gauti struktūras, kurios atspindėtų detaliau reiškinius, bet tipinė MD negali prognozuoti dimeruose esančių efektų.

Kita grupė molekulių – karotinoidai, kurie yra sudaryti iš konjuguotų elementų ir vykdo įvairias funkcijas biologijoje. Vienas tokių karotinoidų – fukosantinas - pasižymintis krūvio pernašos būsenomis, bet tik fotodinamikos procesuose. Pastarasis efektas vyksta poliniuose tirpikliuose, bet yra už tipinės MD simuliacijų metodikos ribų.

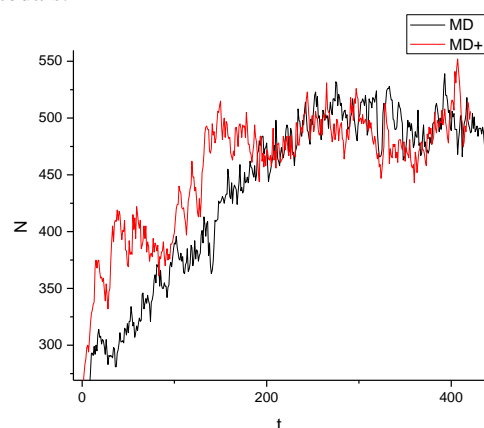


1 pav. Stilbeno kompleksas susidaręs po patikslintos MD

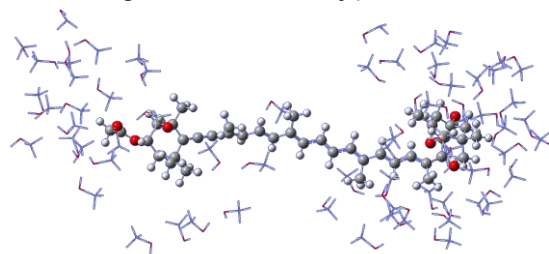
Naudojant DFT ir TD-DFT metodikas B3LYP/cc-pVDZ ir CAM-B3LYP/cc-pVDZ buvo paruošiami *trans*-stilbeno molekulės MD skaičiavimams. Rezultatai palyginti su tipine MD simuliacija. Patikslinta MD simuliacija [2] įskaito daugiau efektų iš kvantinės mechanikos aprašymo, dėl ko MD simuliacijų metu pradėjo formuotis įvairūs kitokie kompleksai (1 pav).

Metodika buvo toliau patikslinta fukosantino molekulei, kurios savybės kinta optiškai aktyvioje sužadintoje būsenoje. Nors MD simuliacija abiem atvejais rodo iki N=560 metanolio molekulių išsidėstymą

(2 pav.) apie pigmentą, bet dinamika yra kitokia bei kitoks metanolio molekulių išsidėstymas. Metanolio molekulės (3 pav.) buvo arčiau karotinoido struktūros bei išsidėstė teis karotinoido galais. Kitoks molekulių išsidėstymas gali būti priežastis ICT būsenų susiformavimui, kurį tikslinga toliau modeliuoti DFT metodais.



2 pav. Fukosantino su metanoliumi kompleksas dviem skirtingomis MD simuliacijų metodikomis



3 pav. Fukosantino su metanoliumi kompleksas susidaręs po patikslintos MD, kur aiškiai matosi susiformavę metanolio klasteriai karotinoido galuose

Reikšminiai žodžiai: molekulių dinamika, kvantinė chemija, superkompiuteris.

Padėka

Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (Nr. S-MIP-23-48). Skaičiavimai buvo atlikti naudojant superkompiuterį "VU HPC" Saulėtekis resursais esančiais Vilniaus universiteto Fizikos fakultete [4].

Literatūra

- [1] R. Karpicz, N. Ostapenko, Y. Ostapenko et al., Phys. Chem. Phys. **23**, 3447 (2021).
- [2] R. Karpicz, G. Kareivaite, M. Macernis et al. Phys. Chem. Phys. **25**, 21183 (2023).
- [3] M. Macernis, S. Streckaitė, R. Litvin et al. J. Phys. Chem. A **126**, 813 (2022).
- [4] M. Macernis, V. Mickus, J. Ahonen et al. arXiv:2210.00934 (2022).