شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی برهم‌کنش مایعات یونی آمینواسیدی بر پایه‌ی آمونیوم با کارواکرول

زهرا رضاپور، سید محمدتقی حامدموسویان*، محمد رزمخواه، فاطمه موسوی
دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده مهندسی، گروه مهندسی شیمی، کدپستی ۹۱۷۷۹۴۸۹۴۴
mosavian@um.ac.ir

چکیده

برهم‌کنش چهار مایع یونی آمینواسیدی (AAILs) تتراتیل‌آمونیوم آلانینات ([N_{2222}][ALA])، تتراتیل‌آمونیوم سیستئینات ([N_{2222}][CYS])، تتراتیل‌آمونیوم گلایسینات ([N_{2222}][GLY]) و تتراتیل‌آمونیوم سرینات ([N_{2222}][SER]) با کارواکرول (CAR) از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) بررسی شد. آنالیزهای تابع توزیع شعاعی (RDF) نشان داد شدت برهم‌کنش آنیون-کارواکرول بسیار بیشتر از شدت برهم‌کنش کاتیون-کارواکرول است. با بررسی مسیر حرکت CAR درکل زمان شبیه‌سازی مشخص شد CAR در مایع یونی [N_{2222}][GLY] بیشترین جابه‌جایی و در حلال [N_{2222}][CYS] کمترین جابه‌جایی CAR را داشته‌است که نشان از درگیری بیشتر و برهم‌کنش قوی‌تر CAR در حلال [N_{2222}][CYS] است.

۱- مقدمه

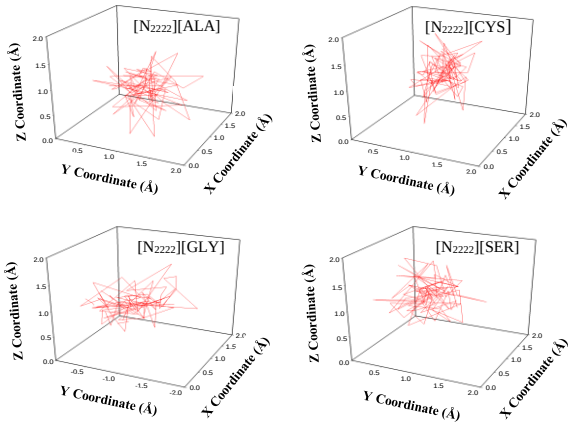
امروزه جهت ممانعت از فساد مواد غذایی، ترکیبات زیست فعالی که در گیاهان وجود دارند به عنوان افزودنی و نگهدارنده در صنایع غذایی مورد استفاده قرار می‌گیرند تا سلامت و زمان ماندگاری مواد غذایی تأمین شود [۱]. کارواکرول (CAR) با فرمول شیمیایی $C_{۱۰}H_{۱۴}O$ در گیاهانی نظیر آویشن، مرزنجوش، پونه‌ی کوهی و مرزه به وفور یافت می‌شود [۲]. CAR خواص بسیاری نظیر ضد سرطان، ضد باکتری، محافظ قلب و کبد را دارا می‌باشد [۳]. این مزایا باعث لزوم استخراج این ترکیب زیستی از گیاهان شده‌است. تاکنون روش‌های استخراج مختلفی همچون سوکسله، فراصوت، سیال فوق بحرانی، مایکروویو با امواج ریزموج و مایع تحت فشار برای CAR استفاده شده‌است. در هریک از این روش‌ها حلال نقش مهمی بر بازده استخراج دارد. بنابراین، انتخاب حلالی با قدرت حلالیت بالا و همچنین عدم تجزیه‌ی بافتی CAR بسیار حائز اهمیت است. در این مطالعه، از مایعات یونی آمینواسیدی (AAILs) به عنوان حلال استفاده می‌شود که دسته‌ی جدیدی از حلال‌های سبز به‌شمار می‌روند و خواص منحصربه‌فردی مانند فشاربخار کم، پایداری گرمایی و شیمیایی بالا، نقطه‌ی ذوب پایین و حلالیت بالا دارند [۴].

۲- روش و جزئیات شبیه‌سازی

ساختار اولیه در سطح محاسباتی B3LPY/6-311++(d,p) بهینه‌سازی و بار اتمی جزئی طبق روش NBO محاسبه شد. سپس تعداد ۲۱۶ جفت یون و چهار مولکول CAR در جعبه‌ی شبیه‌سازی مکعبی در نرم‌افزار دی-ال پلی نسخه‌ی ۲/۱۸ [۵] تکرار شدند. پارامترهای میدان نیرو از میدان نیروی AMBER استخراج گردید [۶]. شبیه‌سازی در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm انجام و برای کنترل دما و فشار از ترموستات و باروستات برندسن استفاده شد. گام زمانی برابر با 1 fs و شعاع قطع برابر با ۱۸ Å بود. مدت زمان کل شبیه‌سازی برابر با ۳۵ ns می‌باشد.

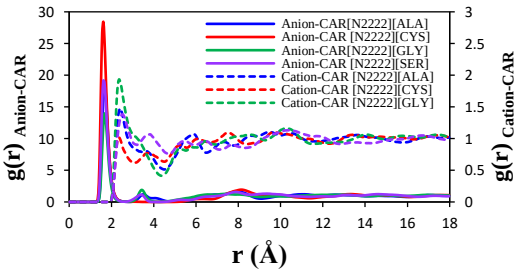
۳- بحث و نتیجه‌گیری

در کل زمان شبیه‌سازی مسیر حرکت CAR رصد و بیشترین حرکت و جابه‌جایی CAR در [N_{2222}][GLY] ملاحظه گردید، درحالی که در حلال [N_{2222}][CYS] انسجام بیشتر و پراکندگی کمتری را از خود نشان داد. بنابراین، CAR در مایع یونی [N_{2222}][CYS] بیشتر درگیر بوده و حلالیت بالایی داشته‌است. مسیر حرکت CAR در کل زمان شبیه‌سازی در شکل ۱ آمده‌است.



شکل ۱- مسیر حرکت CAR در حلال‌های هدف

تابع توزیع شعاعی (RDF) نشان می‌دهد برهم‌کنش آنیون-کارواکرول شدت بیشتری نسبت به کاتیون-کارواکرول دارد. در [N_{2222}][CYS] شدت برهم‌کنش آنیون و CAR بیشترین و در [N_{2222}][GLY] کمترین می‌باشد. بررسی اتمی نشان می‌دهد گروه کربوکسیل آنیون و گروه هیدروکسیل CAR بیشترین درگیری را با یکدیگر برقرار می‌کنند. ترتیب RDF به صورت [N_{2222}][CYS] > [N_{2222}][SER] > [N_{2222}][ALA] > [N_{2222}][GLY] می‌باشد. نمایی از نمودار RDF در شکل ۲ آمده‌است.



شکل ۲- نمودار RDF آنیون-CAR و کاتیون-CAR

۴- نتایج

نتایج RDF و مسیر حرکت CAR نشان داد آنیون [CYS]$^-$ در مقایسه با سه آنیون دیگر در انحلال CAR موفق‌تر عمل می‌کند.

تشکر و قدردانی

از دانشگاه فردوسی مشهد بابت حمایت‌های مادی و معنوی در راستای انجام این پژوهش کمال تشکر را داریم.

مراجع

[۱] Z. E. Suntres, J. Coccimiglio, and M. Alipour, "The bioactivity and toxicological actions of carvacrol," *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, vol. 55, no. 3, pp. 304-318, 2015.

[۲] N. B. Rathod, P. Kulawik, F. Ozogul, J. M. Regenstein, and Y. Ozogul, "Biological activity of plant-based carvacrol and thymol and their impact on human health and food quality," *Trends in Food Science & Technology*, vol. 116, pp. 733-748, 2021.

[۳] M. S. Foote, K. Du, S. Mousavi, S. Bereswill, and M. M. Heimesaat, "Therapeutic oral application of carvacrol alleviates acute campylobacteriosis in mice harboring a human gut microbiota," *Biomolecules*, vol. 13, no. 2, p. 320, 2023.

[۴] A. H. Ab Rahim, N. M. Yunus, Z. Jaffar, M. F. Allim, N. Z. O. Zailani, S. A. M .Fariddudin, N. Abd Ghani, and M. Umar, "Synthesis and characterization of ammonium-based protic ionic liquids for carbon dioxide absorption," *RSC Advances*, vol. 13, no. 21, pp. 14268-14280, 2023.

[۵] W. Smith and T. Forester, "DL_POLY_2. 0: A general-purpose parallel molecular dynamics simulation package," *Journal of Molecular Graphics*, vol. 14, no. 3, pp. 136-141, 1996.

[۶] T. Fox and P. A. Kollman, "Application of the RESP methodology in the parametrization of organic solvents," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 102, no. 41, pp. 8070-8079, 1998.