

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ: MRG5680143

ชื่อโครงการ: ความเข้าใจอย่างลึกซึ้งในธรรมชาติของโครงสร้างคาร์โบไฮเดรตที่เป็นรูป
วงแหวนห้าเหลี่ยมและหกเหลี่ยมในระหว่างการเร่งปฏิกิริยาเคมีของเอนไซม์
ไกลโคซิเดส ศึกษาโดยวิธีการจำลองที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัมและ
กลศาสตร์โมเลกุล

ชื่อนักวิจัย : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.จิตระยุทธ จิตอ่อนน้อม มหาวิทยาลัยพะเยา

E-mail: jitrayut.018@gmail.com

ระยะเวลา: 3 มิถุนายน พ.ศ. 2556 ถึง 2 มิถุนายน พ.ศ. 2558

โครงการวิจัยนี้มีจุดประสงค์เพื่อศึกษากลไกการเกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสของการย่อย
สลายคาร์โบไฮเดรต การปรับเปลี่ยนโครงสร้างของน้ำตาล และบทบาทของกรดอะมิโนที่
เกี่ยวข้องระหว่างเกิดปฏิกิริยาเคมีในเอนไซม์ไคโตเนสบี (ChiB) โดยการประยุกต์ใช้ระเบียบ
วิธีจำลองทางคอมพิวเตอร์ที่ผสมผสานทฤษฎีกลศาสตร์ควอนตัมสมัยใหม่และทฤษฎีกลศาสตร์
โมเลกุลดั้งเดิม (SCC-DFTB/CHARMM22) และทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น ผลการศึกษา
พฤติกรรมของโครงสร้างบริเวณยึดเกาะของซับสเตรตคือโมเลกุลน้ำตาล N-acetylglucosamine
(NAG) กับเอนไซม์ ChiB พบว่าวิธี SCC-DFTB สามารถทำนายโครงสร้างสถานะตั้งต้น (ES)
ได้สอดคล้องกับผลการทดลอง ผลการคำนวณพลังงานอิสระของปฏิกิริยาพบว่าปฏิกิริยามี 2
ขั้นตอน และขั้นแรกของปฏิกิริยาเป็นขั้นกำหนดอัตรา มีค่าพลังงานอิสระของการกระตุ้น (free-
energy of activation) เท่ากับ 20.5 kcal/mol สอดคล้องกับผลการทดลองในห้องปฏิบัติการ (~16
kcal/mol) ในระหว่างเกิดปฏิกิริยาพบโครงสร้างของน้ำตาลตำแหน่ง -1 มีการเปลี่ยนรูปร่าง คือ
boat (${}^{1,4}B$) $\leftrightarrow$ half-chair (4H_5) $\leftrightarrow$ chair (4C_1) นอกจากนี้ยังพบว่ากรดอะมิโนบนตำแหน่งยึด
จับกับน้ำตาล NAG มีผลต่อประสิทธิภาพการย่อยสลายคาร์โบไฮเดรต โดยเฉพาะ Asp142 และ
Tyr214 นอกจากนี้ วิธีการศึกษาด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น ยังสามารถนำไปประยุกต์ใช้
เพื่อศึกษาการปรับเปลี่ยนโครงสร้างของวงเอสเทอร์ในปฏิกิริยาการสังเคราะห์พอลิเมอร์

คำหลัก : ไคโตเนสบี; ปฏิกิริยาเคมีของเอนไซม์; วิธีการจำลองที่ผสมผสานกลศาสตร์ควอนตัม
และกลศาสตร์โมเลกุล; SCC-DFTB; เอนไซม์ไกลโคซิเดส;

