

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ФЕРМЕНТАТИВНЫХ РЕАКЦИЙ

Протекание химической реакции представляет сложную систему из более простых, элементарных реакций, на каждую из которых, в свою очередь, оказывают влияние многочисленные факторы: рН среды, температура, катализаторы, присутствие активаторов и ингибиторов и др. Учет всех факторов приводит к сложным математическим моделям, состоящим из систем дифференциальных и алгебраических уравнений высокого порядка. Решение прямой задачи химической кинетики на «бумаге» возможно лишь с множеством допущений, что в большинстве случаев для простых реакций приводит к существенным ошибкам, а для сложных моно-, двухсубстратных реакций и вовсе невозможно. Таким образом, для решения подобных задач необходимо использование современных вычислительных комплексов, таких как Chemkin, Mathcad, Maple. Но даже используя подобные программы, не всегда возможно получение аналитического решения, и поэтому некоторые задачи имеют лишь численное решение.

Целью нашей работы являлось моделирование ферментативных реакций путем создания расчетного комплекса в среде Mathcad, с помощью которого возможно моделирование систем, в которых протекают ферментативные реакции с учетом комплексного воздействия ингибиторов, изменения рН, концентраций фермента, субстратов и продуктов реакций.

Объектом исследования являлись сложные динамические системы, в которых протекают ферментативные реакции. Предметом исследования являлось численное решение прямой задачи химической кинетики в зависимости от меняющихся условий.

Для реализации поставленной задачи нами был выбран пакет Mathcad, так как открытость, наглядность расчетов, проводимых в данной среде, делает его не только привлекательным вычислительным, но и образовательным инструментом, позволяющим эффективно применять его в учебном процессе как средство визуализации основных понятий химическом кинетики. С другой стороны, пакет Mathcad вслед за электронными таблицами создавался как программное средство, альтернативное традиционным языкам программирования. Иногда химическая задача не может быть решена студентом и даже специалистом из-за того, что на каком-то этапе решения она «переходит» из плоскости химии в плоскость информатики, требуя от решающего глубоких знаний языков программирования. Но химик, как правило, не имеет таких знаний. Пакет же Mathcad позволяет решать широкий круг научных, инженерно-технических и учебных задач без обращения к традиционному программированию.

В ходе работы нами было смоделировано протекание ряда моносубстратных ферментативных реакций без квазистационарного и с учетом квазиравновесного приближений (в численном виде была решена прямая задача химической кинетики).

В аналитическом виде получены выражения, позволяющие осуществить учет влияния различных типов ингибирования (конкурентного, неконкурентного и бесконкурентного) на протекание ферментативной реакции по заданному механизму; зависимости концентраций фермент-субстратных комплексов от меняющихся значений pH, на основе которых возможно исследование протекания данной ферментативной реакции в широком интервале pH.

Исследовано протекание реакций при изменении соотношений субстрат/фермент и концентраций продуктов реакции.

Используя квазистационарное приближение для ряда моносубстратных и двухсубстратных реакций, построены математические модели их протекания в зависимости от перечисленных выше факторов. Произведен расчет констант Михаэлиса и ингибирования. В этом случае результаты получены в аналитической форме.

Результаты данной работы могут быть использованы для прогнозирования протекания реакций применительно к реальным технологическим процессам с участием ферментов, а также при организации учебно-исследовательских лабораторных работ по теме «Ферментативный катализ» в курсах «Физическая химия» и «Биохимия».