

УДК 541.64:539.199:547.458.81

КОНФОРМАЦИЯ ИЗОЛИРОВАННОЙ СПИРАЛИ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

*Перчин А. И., Нугманов О. К., Сопин В. Ф.,
Марченко Г. Н., Битайгородский А. И.*

Предложен алгоритм сочленения повторяющихся звеньев одномерного полимера в спираль заданной симметрии. Минимизацией полной энергии спирали как функции независимых конформационных параметров найдены устойчивые конформации изолированной спирали целлюлозы. Наиболее стабильная конформация характеризуется наличием водородной связи $O_5 \dots HO_3'$, а также связей $O_2 \dots HO_6'$ и $O_1 \dots HO_6'$. В четырех других устойчивых конформациях присутствуют помимо связи $O_5 \dots HO_3'$ водородные связи $O_2H \dots O_6'$ и $O_6H \dots O_3'$.

Целлюлоза является одним из первых полимеров, подвергнутых структурному анализу. Несмотря на это, проблема строения кристаллических областей целлюлозы в ее различных полиморфных модификациях вряд ли может считаться решенной. Вплоть до последнего времени появляются экспериментальные и расчетные работы, которые предлагают новые структурные модели целлюлозы, часто не согласующиеся между собой [1–5].

Как известно, прямое экспериментальное определение структуры целлюлозы дифракционными методами чрезвычайно затруднено. Типичные картины электронной или рентгеновской дифракции на хорошо ориентированных волокнах целлюлозы содержат, как правило, лишь несколько десятков отражений, что недостаточно для определения координат всех атомов в элементарной ячейке. Некоторая дополнительная информация о строении макромолекул целлюлозы может быть получена спектроскопическими методами, однако их возможности весьма ограничены, а результаты допускают неоднозначную интерпретацию.

Указанные обстоятельства заставляют привлекать для решения структурной задачи некоторые закономерности стереохимии и упаковки молекул. Так, при поиске оптимальной структурной модели можно принять, что число межмолекулярных контактов и число водородных связей в структуре должно быть максимальным, а отклонение длин связей, валентных и торсионных углов от их стандартных значений — минимальным.

Именно с привлечением подобных соображений были в последние годы построены структурные модели большинства известных модификаций целлюлозы [1–5]. Существенным недостатком указанных работ является отсутствие в них энергетического критерия для оценки относительно устойчивой той или иной конформации или упаковки. В работе предпринята попытка рассчитать молекулярную и кристаллическую структуры целлюлозы методом атом-атомных потенциалов, успешно зарекомендовавшим себя в расчетах структуры низкомолекулярных органических веществ [6].

Хорошо известно [6], что для большинства низкомолекулярных органических твердых тел конформация молекулы в кристалле мало отличается от ее конформации в изолированном состоянии. Для гибких длинноцепочечных молекул возможны, конечно, более существенные различия.

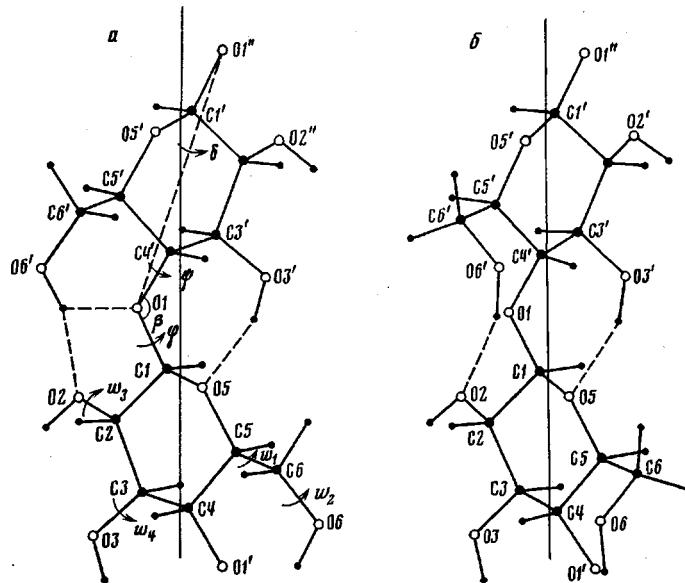


Рис. 1а, б

Однако и в этом случае можно предположить, что конформация молекул в кристалле будет близка к одному из локальных минимумов на энергетической поверхности изолированной молекулы. Влияние кристаллического поля скажется лишь в том, какой из локальных минимумов будет реализован в данной структуре. Учитывая это обстоятельство, резонно начать исследования с анализа структуры изолированной макромолекулы целлюлозы. Цель этого анализа — выявить локальные минимумы на энергетической поверхности макромолекулы, т. е. «опорные точки», среди которых впоследствии будет проводиться поиск оптимальной укладки макромолекул в кристалле.

Методика расчета. Энергию макромолекулы целлюлозы рассчитывали как сумму невалентных взаимодействий, потенциалов водородных связей, энергии деформации валентных и торсионных углов. Для невалентных взаимодействий использовали потенциальные функции Дащевского [7]. Силовую константу деформации валентного угла при глюкозидном атоме кислорода принимали равной 272 кДж/моль при идеальном значении угла 90°. Торсионную энергию углов поворота вокруг связей типа С—С и С—О вычисляли по формуле $U_0/2(1+\cos 3\phi)$ с параметрами U_0 , равными 1,4 (С—С) и 1,5 (С—О) кДж/моль в расчете на один двугранный угол.

Конформацию глюкопиранозного цикла полагали неизменной в ходе расчетов. Значения длин связей, валентных и торсионных углов цикла были заимствованы из работы Арнотта и Скотта [8]. Независимымиарьирируемыми параметрами повторяющихся единиц были четыре торсионных угла, задающих ориентацию гидроксиметиленовой (ω_1) и трех гидроксильных групп (ω_2 , ω_3 , ω_4) (рис. 1, а). Торсионный угол ω_1 определялся четверкой атомов С(4)—С(5)—С(6)—О(6), а углы ω_2 , ω_3 , ω_4 — атомами С(5)—С(6)—О(6)—Н(61), С(1)—С(2)—О(2)—Н(21) и С(2)—С(3)—О(3)—Н(31) соответственно. Для всех торсионных углов использовали систему отсчета, принятую в работе [1]. Построение цепи из мономерных единиц проводили по специальному алгоритму, описанному ниже. Валентный угол глюкозидной связи β оказывался при этом зависимой переменной, определяемой параметрами спирали.

Проблема построения регулярной спиралы в ходе минимизации энергии системы требует особого внимания. В большинстве предшествующих

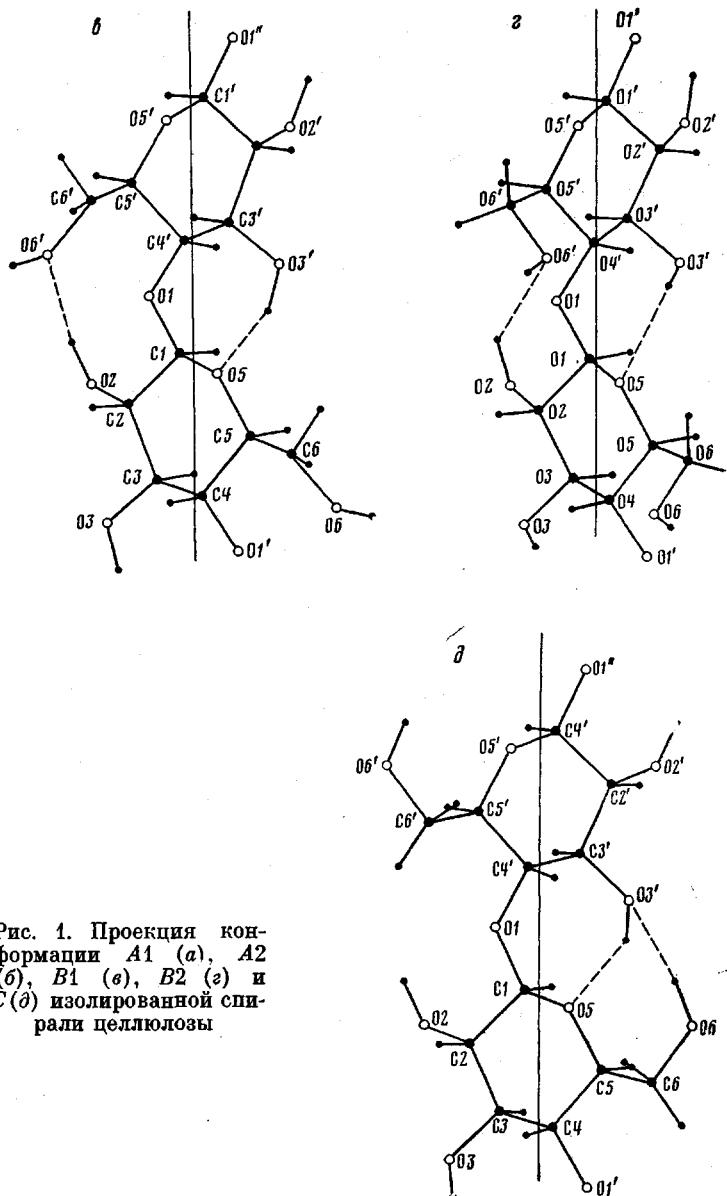


Рис. 1. Проекция конформации A_1 (а), A_2 (б), B_1 (с), B_2 (д) и C (д) изолированной спирали целлюлозы

работ эта проблема не решалась вовсе, т. е. конформация основной цепи макромолекулы сразу принималась удовлетворяющей спиральной симметрии и не варьировалась в ходе расчетов. В работе [8] положение мономерного звена в пространстве задавалось с помощью четырех параметров — расстояния до оси спирали и трех углов Эйлера, описывающих ориентацию мономерного звена относительно системы координат спирали. Несложно, однако, показать, что для спирали заданного типа (скажем, 2₁, как в целлюлозе) и при заданной геометрии повторяющегося звена требуется всего две независимые переменные, описывающие сочленение мономерных единиц. В работе [8] исключение двух зависимых переменных из упомянутых четырех проводилось с помощью штрафных функций, «натягивающих» мономерные звенья на спираль. Данная процедура неудовлетворительна по двум причинам. Во-первых, исключение зависимых переменных методом штрафных функций приводит, как правило,

к резкому ухудшению сходимости процедуры минимизации. Во-вторых, в каждой текущей точке процесса минимизации полимерная цепь не является строгой спиралью и не обладает, следовательно, трансляционной симметрией. Это, в свою очередь, недопустимо при расчете кристаллической структуры. Алгоритм, предлагаемый в настоящей работе, свободен от указанных недостатков. Кроме того, он обладает следующими двумя преимуществами. Во-первых, в рамках данного алгоритма шаг спирали (величина, хорошо известная из эксперимента) оказывается независимым параметром сочленения, что чрезвычайно удобно для конкретных вычислений.

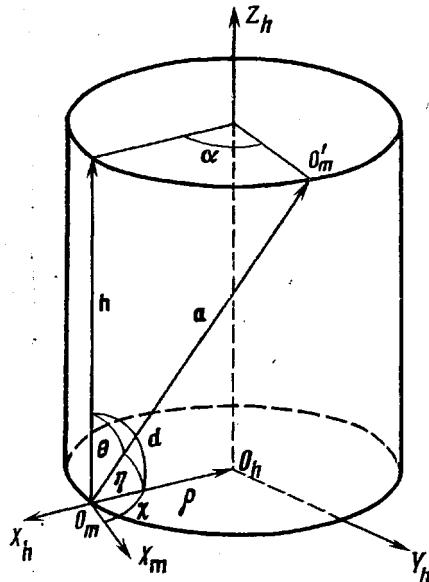


Рис. 2

Рис. 2. Схема сочленения повторяющихся единиц в спираль

Рис. 3. Допустимые области вариирования угла δ : 1 – зависимость угла β глюкозидной связи от угла δ , 2 – зависимость межатомного расстояния $O2 \dots O6'$ от угла δ

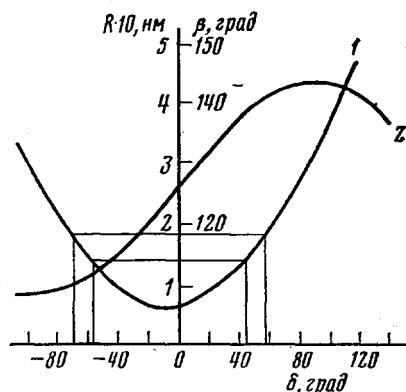


Рис. 3

лений. Во-вторых, алгоритм применим к макромолекулам любой симметрии и с любым строением основной цепи. Последнее отличает предлагаемый алгоритм от известных аналитических методов исключения зависимых переменных, каждый из которых применим к макромолекулам лишь с определенным строением основной цепи [9].

Разделим полимерную цепь на химически идентичные, периодически повторяющиеся элементарные звенья таким образом, чтобы отдельные звенья сочленялись друг с другом в точке (атоме). Подобное разделение всегда возможно для одномерных полимеров, исключая лестничные. Для целлюлозы и ее производных удобно выбрать в качестве узлов сочленения глюкозидные атомы кислорода (O_1 , O_1' и т. д.) (рис. 1). Определим элементарное звено так, чтобы оно включало в себя оба атома сочленения (на входе и на выходе из звена). То обстоятельство, что каждый атом в сочленении окажется в составе двух звеньев, легко учесть при подсчете энергии полимерной цепи.

Пусть точка O_m на рис. 2 – один из узлов сочленения исходного элементарного звена. Выберем систему координат звена таким образом, чтобы начало координат совпадало с O_m . Координатные оси X_m , Y_m и Z_m можно связать со звеном множеством способов. Для целлюлозы удобно выбрать ось X_m вдоль связи O_1-C_1 , а ось Y_m принять лежащей в плоскости $O_1-C_1-C_2$.

На первом этапе ЭВМ рассчитывает декартовы координаты атомов исходного звена в системе координат $\{O_m, X_m, Y_m, Z_m\}$. Входными данными являются здесь $3N-6$ независимых естественных координат – длин свя-

зей, валентных и торсионных углов (N – число атомов в звене, для целлюлозы $N=22$). В число независимых естественных координат входят и четыре варьируемые независимые координаты ω_1 , ω_2 , ω_3 и ω_4 , упомянутые ранее.

Присоединение последующего звена к исходному проводится следующим образом. Находится вектор a , связывающий узлы сочленения на входе и выходе исходного звена (точки O_m и O_m' на рис. 2 или атомы $O1'$ и $O1$ на рис. 1, a). Если в качестве независимого параметра сочленения выбирается шаг спирали h , то расстояние r от O_m до оси спирали (положение которой в пространстве пока не известно) легко определяется по формуле

$$r = \left[\frac{a^2 - h^2}{2(1 - \cos \alpha)} \right]^{1/2}, \quad (1)$$

где $a = |a|$, α – угол закрутки спирали (для целлюлозы 180°). Далее легко определить углы θ и η , которые должны образовывать соответственно ось спирали и радиус-вектор ρ с вектором a (рис. 2)

$$\cos \eta = r(1 - \cos \alpha)/a, \quad \cos \theta = h/a \quad (2)$$

Введем второй параметр сочленения – угол χ , который образует вектор ρ с осью X_m . Теперь, следуя стандартной методике нахождения вектора по двум известным векторам и двум углам, которые образует искомый вектор с ними, легко найти вектор ρ (по векторам a , X_m и углам η и χ) и вектор h (по векторам a , ρ и углам θ , $d=90^\circ$).

При минимизации энергии спирали как функции геометрических параметров использование угла χ в качестве одного из независимых параметров не вполне удобно. Действительно, нетрудно показать, что область варьирования параметра χ не всегда является односвязной. Более удобным параметром оказывается двугранный угол δ , образованный двумя плоскостями, в которых лежат соответственно векторы a , X_m и a , ρ . Угол δ описывает вращение мономерного звена вокруг вектора a и может варьировать от -180 до 180° . Связь между δ и ранее определенным углом χ имеет вид

$$\cos \delta = \frac{\cos \chi - \cos \eta \cdot \cos \alpha}{\sin \eta \cdot \sin \chi}, \quad (3)$$

где χ – угол между векторами a и X_m . Заметим, что угол δ , определенный указанным образом, совпадает с углом φ , предложенным Джонсом [10] для описания взаимной ориентации глюкопиранозных циклов. Угол δ равен нулю, когда все три вектора ρ , a и X_m лежат в одной плоскости. Значения δ положительны, когда тройка векторов ρ , a и X_m правая.

Таким образом, положение оси спирали в системе координат $\{O_m, X_m, Y_m, Z_m\}$, однозначно определяемое векторами ρ и h , легко находится для любого a заданием двух независимых параметров, h и δ . Напомним, что тип спирали, определяемый углом закрутки α , полагается известным и неизменным в ходе вычислений.

После нахождения оси спирали координаты исходного звена переводятся в цилиндрическую систему координат, обозначенную на рис. 2 как O_h, X_h, Y_h, Z_h . Построение последующих элементарных звеньев проводится поворотом координат исходного звена вокруг оси Z_h на угол α и сдвигом вдоль оси Z_h на величину шага h .

Энергия спирали E_{hel} рассчитывается как сумма двух компонент: $E_{hel} = E_{mon} + E_{conj}$, где E_{mon} – внутренняя энергия исходного звена, а E_{conj} – энергия сочленения. Величина E_{mon} одинакова для всех элементарных звеньев и зависит только от $3N-6$ его независимых координат. В настоящей работе варьировались лишь четыре из этих координат, следовательно, $E_{mon} = E_{mon}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)$. Энергия сочленения включает энергию невалентных взаимодействий элементарных звеньев (включая возможные во-

водородные связи) и энергию деформации валентных и торсионных углов в сочленении, причем E_{conj} зависит уже и от независимых параметров спирали δ и h . Таким образом, полная энергия спирали является функцией шести переменных: $E_{hel} = E_{hel}(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \delta, h)$.

Устойчивые конформации спирали находили минимизацией E_{hel} в пространстве шести варьируемых переменных. Минимизацию проводили методом Флетчера [11].

Для нахождения области допустимых конформаций основной цепи, согласующихся с экспериментально наблюдаемым периодом спирали, был

Таблица 1

Структурные и энергетические параметры устойчивых конформаций спирали целлюлозы

Конформация	Независимые варьируемые параметры						Зависимые параметры			E_{mon}	E_{conj}	E_{hel}
	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	δ	h	β	φ	ψ			
<i>A1</i>	63,5	-52,1	174,1	169,7	44,0	5,16	117,3	28,1	-29,5	-15,1	-4,2	-19,3
<i>A2</i>	-20,3	79,0	178,7	180,4	36,3	5,17	116,1	23,7	-24,9	4,6	8,4	13,0
<i>B1</i>	67,8	167,2	-52,9	170,6	44,0	5,16	117,5	28,0	-29,4	-9,6	10,9	1,3
<i>B2</i>	-17,1	183,9	-37,7	180,3	36,2	5,17	115,9	23,7	-24,9	-6,7	4,2	-2,5
<i>C</i>	174,3	46,6	-56,1	-121,6	53,2	5,11	117,2	34,4	-36,0	-10,0	9,6	-0,4

проведен предварительный расчет, в котором шаг спирали полагался постоянным, а угол δ варьировался с шагом 10° от -180 до 180° . На рис. 3 показана зависимость угла β при глюкозидном атоме кислорода от угла δ для $h=0,51$ нм. Видно, что разумные значения углов β ($114^\circ < \beta < 118^\circ$) находятся в двух сравнительно узких областях: $44^\circ < \delta < 58^\circ$ и $-70^\circ < \delta < -56^\circ$. На том же графике приведена зависимость расстояния $O_2 \dots O_6'$ от угла δ . Видно, что область $-70^\circ < \delta < -56^\circ$ можно с полным основанием исключить из рассмотрения из-за наличия слишком коротких контактов $O_2 \dots C_6'$. Это значительно упрощает задачу нахождения оптимальной спирали целлюлозы.

Последующие вычисления состояли в минимизации E_{hel} по всем шести независимым параметрам. Начальные значения для δ брали из интервала $44^\circ < \delta < 58^\circ$, а начальное значение h принимали равным 0,51 нм. Что касается переменных $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4$, то их исходные значения для минимизации выбирали произвольным образом с помощью генератора случайных чисел.

В результате расчетов было обнаружено пять устойчивых конформаций, обозначенных в табл. 1 и 2 как *A1*, *A2*, *B1*, *B2*, *C*. В первых шести графах табл. 1 приведены значения независимых переменных, соответствующих локальным минимумам энергии E_{hel} . Далее идут три зависимых параметра сочленения — угол β глюкозидной связи, а также углы φ и ψ , которые обычно употребляют для описания взаимной ориентации циклов в полисахаридах [1, 2]. В последующих графах табл. 1 приводятся некоторые энергетические характеристики устойчивых конформаций.

В табл. 2 сведены параметры водородных связей, образующихся в каждой из конформаций, — энергия связи, а также расстояния $O \dots O$ и $O \dots H$. Все величины, имеющие размерность энергии, приведены в кДж/моль мономерных единиц, расстояния — в нм, а углы — в градусах.

Как видно из табл. 2, все устойчивые конформации целлюлозы характеризуются наличием водородной связи $O_5 \dots O_3$ с энергией 16,7 кДж/моль. Присутствие такого рода связи в целлюлозе подтверждается многими экспериментальными данными и является, пожалуй, бесспорным фактом. В конформациях *A1*, *A2*, *B1* и *B2* имеются также связи $O_2 \dots O_6'$, а в кон-

формации С—О6...О3' (относительно связи О6'...О1 в конформации *A1* см. ниже).

Как видно из табл. 1, в конформациях *A1* и *B1* ориентация гидроксиметиленовой группы близка к *tg*-положению ($\omega_1=60^\circ$), в конформации *C* — к *gt*-положению; в конформациях *A2* и *B2* ориентация группы ближе всего к *gg*-положению, хотя отклонения углов ω_1 от идеального значения, соответствующего *gg*-положению, весьма велики (определение *tg*-, *gt*- и *gg*-положений гидроксиметиленовой группы см., например, в работе

Таблица 2

Параметры водородных связей, присутствующих в устойчивых конформациях спирали целлюлозы

Конформация	Тип связи	$R_{O...O} \cdot 10$, нм	$R_{O...H} \cdot 10$, нм	Энергия связи
<i>A1</i>	О5...НО3'	2,60	1,81	16,7
	О2...НО6'	2,69	1,85	16,4
	О1...НО6'	2,71	2,06	11,8
<i>A2</i>	О5...НО3'	2,70	1,86	16,2
	О2...НО6'	2,70	1,88	16,0
<i>B1</i>	О5...НО3'	2,60	1,81	16,7
	О2Н...О6'	2,60	1,82	16,7
<i>B2</i>	О5...НО3'	2,70	1,86	16,3
	О2Н...О6'	2,75	1,93	15,0
<i>C</i>	О5...НО3'	2,41	1,89	15,7
	О6Н...О3'	2,86	1,98	13,9

[12]). Отличие конформаций типа *A* от конформаций типа *B* заключается в способе завязывания связи О2...О6'. В конформациях *A* наблюдается связь О2...НО6', а в конформациях *B* — О2Н...О6'.

Все три типа водородных связей широко обсуждались в литературе, и доводы в пользу того или иного типа можно найти, например, в работах [8, 12, 13]. Существенно, однако, отметить следующее. Для конформаций типа *A* и *B* обычно предполагалось, что образование связи О2...О6' возможно лишь при *tg*-положении гидроксиметиленовой группы [1, 12]. Расчеты показывают, что существует еще одно положение этой группы (с $\omega_1 \approx -20^\circ$), при котором завязывается связь О2...О6'. Причем это справедливо как для водородной связи О2Н...О6', так и для связи О2...НО6'.

Анализ конформационных параметров, приведенных в табл. 1, показывает, что все пять найденных стабильных конформаций макромолекулы целлюлозы имеют равновесное значение шага спирали *h*, хорошо соглашающееся с экспериментальным периодом идентичности (1,03 нм). Равновесные величины угла при глюкозидном атоме кислорода также близки к значениям этого угла, обычно наблюдаемым в углеводах и полисахаридах. Торсионные углы ϕ и ψ в конформациях *A* и *B* отличаются не более чем на 3–4° от соответствующих углов в предложенной недавно структурной модели целлюлозы II ($\phi=24,7$, $\psi=-26,2^\circ$ [1, 2]).

Наиболее предпочтительной, как видно из табл. 1, является конформация *A1*, энергия которой на ~18,8 кДж/моль ниже энергии конформаций *B1*, *B2* и *C* и на 32,2 кДж/моль ниже энергии конформации *A2* (проекции конформаций *A1*, *A2*, *B1*, *B2* и *C* на плоскость $X_hO_hZ_h$ изображены на рис. 1, б–д соответственно). Необходимо, однако, отметить, что в конфор-

O1¹

мации A1 присутствует водородная связь вида O6'Н . . . (внутримо-

O2

лекулярные водородные связи подобного типа были описаны в работе [14]). В рамках метода атом-атомных потенциалов энергия этой связи аддитивно складывается из энергий связи O6'Н . . . O2 и O6'Н . . . O1 и составляет $16,4 + 11,8 = 28,2$ кДж/моль. Ясно, что полученная величина является завышенной, поскольку неаддитивность взаимодействий должна играть весьма существенную роль в рассматриваемом фрагменте. Реаль-

O2

ные значения энергии связи O6'Н . . . лежат, скорее всего, в интервале

O1

от 16,4 до 28,2 кДж/моль. Важно отметить, что даже в том случае, когда мы полностью пренебрегаем присутствием связи O6'Н . . . O1, энергия конформации A1 оказывается ощутимо ниже энергий остальных конформаций.

Расчеты конформационной энергии изолированной макромолекулы целлюлозы, проведенные при фиксированной геометрии глюкопиранозного цикла, выявили пять наиболее устойчивых конформаций, характеризуемых присутствием водородной связи O5 . . . O3', а также связей O2 . . . O6' (конформации типа A и B) и O6 . . . O3' (конформация C).

Наличие целого набора стабильных конформационных состояний может объяснить, на наш взгляд, многообразие структурных модификаций целлюлозы. Необходимо подчеркнуть, что пять полученных конформаций изолированной спирали целлюлозы значительно отличаются друг от друга расположением свободных гидроксильных атомов водорода и атомов кислорода, способных к участию в межмолекулярных водородных связях. Другими словами, все пять устойчивых конформаций макромолекулы имеют существенно различное расположение точек возможных контактов с соседними макромолекулами, что должно приводить к различным способам укладки макромолекул в кристалле. Кроме того, не исключено, что в отдельных кристаллических модификациях целлюлозы фигурирует более чем одна устойчивая конформация макромолекулы, а также конформации с внутримолекулярными водородными связями только одного типа (скажем, O5 . . . O3'). В последнем случае «насыщение» системы водородными связями может происходить за счет образования дополнительных межмолекулярных водородных связей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kolpak F. J., Blackwell J. Determination of the Structure of Cellulose II.— Macromolecules, 1976, v. 9, p. 273.
2. Kolpak F. J., Weih H., Blackwell J. Mercerization of Cellulose: I. Determination of the Structure of Mercerized Cotton.— Polymer, 1978, v. 19, p. 123.
3. Sarko A., Southwick J., Hayashi J. Packing Analysis of Carbohydrate and Polysaccharides. 7. Crystal Structure of Cellulose III and its Relationship to Other Cellulose Polymorphs.— Macromolecules, 1976, v. 9, p. 857.
4. Sarko A., Muggli R. Packing Analysis of Carbohydrates and Polysaccharides. 3. Vallenia Cellulose and Cellulose II.— Macromolecules, 1974, v. 7, p. 486.
5. Hunter R. E., Dweltz N. E. Structure of Cellulose II.— J. Appl. Polymer Sci., 1979, v. 23, p. 249.
6. Китайгородский А. И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1972, 424 с.

¹ Водородная связь с участием глюкозидного атома кислорода O6'Н . . . O1 рассматривалась еще Германском [12]. Позднее принципиальная возможность существования этой связи была подтверждена экспериментально на модельных соединениях [13]. Расчеты энергии изолированного глюкопиранозного звена, проведенные нами, также указали на возможность образования связи O6'Н . . . O1 с энергией ~13,8 кДж/моль.

7. Дащевский В. Г. Конформации органических молекул. М.: Химия, 1974, 431 с.
8. Arnott S., Scott W. E. Accurate X-ray Diffraction Analysis of Fibrous Polysaccharides Containing Pyranose Rings. Part I. The Linked-Atom Approach.—J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1972, v. 3, p. 324.
9. Туманян В. Г., Манаева О. К., Бочаров А. Л., Иванов В. И., Карпейский М. Я., Яковлев Г. И. Докл. АН СССР, 1974, т. 214, с. 1452.
10. Jones D. W. Crystalline Modifications of Cellulose. Part III. The Derivation and Preliminary Study of Possible Crystal Structures.—J. Polymer Sci., 1958, v. 32, p. 371.
11. Fletcher R. Fortran Subroutine for Minimization by Quasinewton methods.—Trans. Amer. Crystallogr. Assoc., 1970, v. 6, p. 57.
12. Целлюлоза и ее производные / Под редакцией Байклза Н., Сегала Л. М.: Мир, 1974, 499 с.
13. Lafuma F., Quivoron C. Liaisons Hydrogène Interamoléculaires. Dans les Chaines de Cellulose.—J. Polymer Sci. Polymer Symp., 1975, N 52, p. 261.
14. Пиментел Дж., Мак-Келлан О. Водородная связь. М.: Мир, 1964, с. 166.

Институт элементоорганических
соединений им. А. Н. Несмеянова
АН СССР

Поступила в редакцию
4.II.1980

CONFORMATION OF ISOLATED CELLULOSE HELIX

*Pertsin A. I., Nugmanov O. K., Soptin V. F.,
Martchenko G. N., Kitaygorodskii A. I.*

Summary

The algorithm of the conjugation of recurring units of one-dimensional polymer into the helix of given symmetry is proposed. The stable conformations of isolated cellulose helix are found by the minimization of the total energy of the helix as a function of independent conformational parameters. The energy of a helix is calculated by atom-atom potentials method. The most stable conformation is characterized by an existence of $O_5 \dots HO_3'$ hydrogen bond, as well as $O_2 \dots HO_6'$ and $O_1 \dots HO_6'$ bonds. Four other stable conformations have besides $O_5 \dots HO_3'$ bond the $O_2H \dots O_6'$ and $O_6H \dots O_3'$ hydrogen bonds.