

**Министерство образования и науки Украины**

**Национальный технический университет  
«Харьковский политехнический институт»**

**Ivane Javakhishvili Tbilisi State University**

**University of Life Sciences in Lublin, Poland**

**Харьковский государственный университет  
питания и торговли**

**Харьковский национальный университет внутренних дел**

**Национальный университет «Львівська політехніка»**

**ХИМИЯ, БИО- И НАНОТЕХНОЛОГИИ,  
ЭКОЛОГИЯ И ЭКОНОМИКА В ПИЩЕВОЙ  
И КОСМЕТИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

**Сборник материалов V  
Международной научно-практической  
конференции**

**17–18 октября 2017 г.**

**Харьков  
2017**

УДК 620.3:664(063)

**Редакционная коллегия:**

*Tamaz Mdžinarashvili*, Full Prof., Ivane Javakhishvili Tbilisi State University, Director of biophysical Graduate program, Director of Institute Medical and Applied Biophysics, Тбилиси, Грузия

*Ewa Solarzka*, Prof. dr hab., Department of Biotechnology, Human Nutrition and Science of Food Commodities, University of Life Sciences in Lublin, Польша.

*Бобало Ю.Я.*, д.т.н., проф., ректор Национального университета «Львовская политехника», Украина.

*Воронов С.А.*, д.х.н., проф., Заведующий кафедрой органической химии Национального университета «Львовская политехника», Украина.

*Гринченко О.А.*, д.т.н., проф., зав. кафедрой технологии питания ХДУХТ, г. Харьков, Украина.

*Донченко Г.В.*, д.б.н., проф., член-кор НАНУ, заведующий отделом биохимии коферментов института биохимии им. О.В. Палладина НАН Украины.

*Жилякова Е.Т.*, д.фарм.н., проф. каф. фармацевтических технологий Белгородского гос. национального исследовательского университета г. Белгород, Россия.

*Капрельяниц Л.Л.*, д.т.н., проф., проректор ОНАХТ, Украина.

*Кричковская Л.В.*, д.б.н., проф. НТУ «ХПИ», Украина.

*Панченко Ю.В.*, к.х.н., доц., заместитель заведующего кафедрой органической химии Национального университета «Львовская политехника», Украина.

*Петрова И.А.*, д.ю.н., к.т.н., проф., Харьковский национальный университет внутренних дел, Украина.

*Николенко Н.В.*, д.х.н., проф., заведующий кафедрой аналитической химии и химической технологии пищевых добавок и косметических средств Днепропетровского ГХТУ, Украина

*Швец В.И.*, академик РАН, зав. каф. бионанотехнологии Московского государственного университета тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия.

*Шевчук С.В.*, гл. химик ООО «Аромат», Украина.

**Химия, био- и нанотехнологии, экология и экономика в пищевой и косметической промышленности:** Сборник материалов IV Международной научно-практической конференции, 17–18 октября 2017 г. – X., 2017. – 260 с.

В сборнике отражены публикации и ценные предложения о решении проблем и перспектив развития химии, био- и нанотехнологии, экологии и экономики в пищевой и косметической промышленности. В нем содержатся работы специалистов, как научных работников Национального технического университета «Харьковского политехнического института», так и других ВУЗов Украины, Беларуси, России, Европы. Все работы обладают научной ценностью и практическими рекомендациями. Сборник рекомендован для научных работников, которые исследуют проблемы химии, био- и нанотехнологии, экологии и экономики в пищевой и косметической промышленности, а также для преподавателей, аспирантов и студентов высших учебных заведений Украины и других стран.

УДК 620.3:664(063)

2. Аминокислоты – наноразмерные молекулы: клинико-лабораторные исследования / И.С. Чекман, А.О. Сырвая, И.В. Новикова [и др.] – Х. : Щедра садиба плюс, 2014. – 154 с.

3. Наночастицы и нанотехнологии в медицине сегодня и завтра / Л.Ф. Абаева, В.И. Шумский, Е.Н. Петрицкая [и др.] // Альманах клинической медицині. – 2010. – № 22. – С. 10-16.

4. Дерматофармакология: монография / И.С. Чекман, Т.В. Звягинцева, А.О. Сырвая, Е.В. Коляденко. – Х. : ООО «Эдэна», 2010. – 128 с.

5. Фельдблум В. «Нано» на стыке наук: нанообъекты, нанотехнологии, нанобудущее / В. Фельдблум. – Ярославль : Электронное междисциплинарное издание, 2013. – 268 с.

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АССОЦИИ ТРОПОКОЛЛАГЕНА

Вовчинский И.С.<sup>1</sup>, Филатов Я.И.<sup>1</sup>, В.В. Евлаш<sup>2</sup>, А.Л. Фоцан<sup>2</sup>,  
С.М. Губский<sup>2</sup>, Калугин О.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина,  
Харьков, Украина*

*Vovchinsky7898@gmail.com*

<sup>2</sup>*Харьковский государственный университет питания и торговли,  
Харьков, Украина*

Популярность желатина (коллагена) в качестве гелеобразователя в пищевой промышленности обусловлена его дешевизной и разнообразием видов желатина в зависимости от исходного сырья и технологии производства. Для понимания влияния состава желатина на особенности гелеобразования необходимо исследовать эту проблему на атомно-молекулярном уровне, что невозможно без использования методов молекулярно-динамического моделирования и квантово-химических расчетов в качестве методов исследования.

В настоящей работе проведено моделирование ассоциации молекул тропоколлагена как структурных единиц, лежащих в основе процессов гелеобразования желатиновых растворов. В настоящей работе была использована начальная структура тропоколлагена из работы [1] с тремя наиболее часто встречаемыми аминокислотами: глицином (Gly), пролином (Pro) и гидроксипролином (Hyp) (рис. 1).

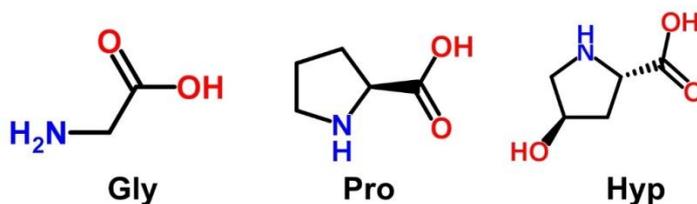


Рисунок 1. Аминокислоты, входящие в состав исследуемого тропоколлагена

Молекулярно-динамическое моделирование проводили с помощью программного пакета GROMACS, в рамках силового поля GROMOS версия 54A7 (gromos54a7.ff) [2]. Моделируемая система (Рисунок 2) представляла собой две тройные спирали коллагена, помещенные в центре кубической ячейки (с ребром 10 нм) на расстоянии 2.5 нм друг от друга в растворителе – воде (модель SPC/E, 32560 молекул).

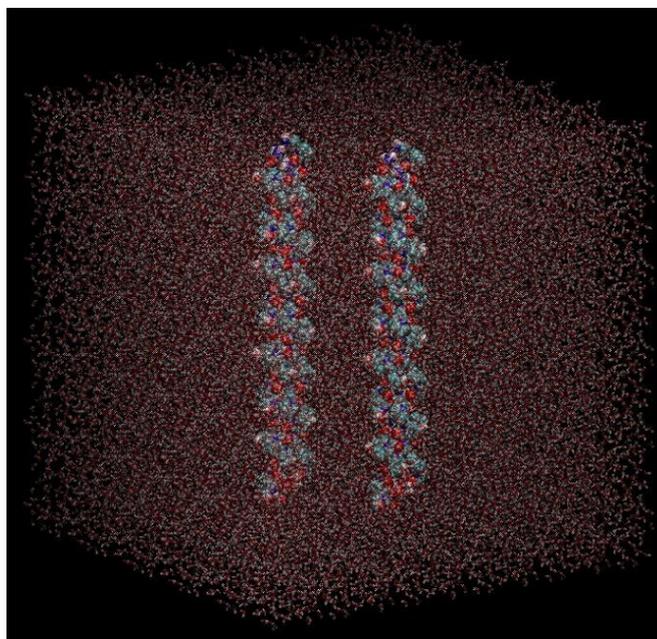


Рисунок 2. Начальная конфигурация моделируемой системы

В ходе работы были детально изучены как водородные связи внутри тройных спиралей, так и между ними. Было установлено, что стабильность молекул тропоколлагена в водной среде обеспечивается главным образом водородными связями между -NH группами глицина одной из  $\alpha$ -цепей коллагена и атомами кислорода пролина другой  $\alpha$ -цепи. Проведенный анализ вдоль фазовой траектории в течении 15 нс показал, что в среднем на приблизительно 9 нм длины в молекуле тропоколлагена реализуется от 15 до 20 сильных водородных связей. Межмолекулярная ассоциация молекул тропоколлагена осуществляется в основном за счет водородных связей между гидроксипролиновыми остатками аминокислот, принадлежащих разным молекулам тропоколлагена.

По результатам квантово-химического анализа соответствующих водородных связей было установлено, что донорные атомы кислорода гидроксипролина одной из  $\alpha$ -цепей коллагена одной тропоколлагеновой молекулы образуют помимо классических (сильных) H-связей с NH (Gly) или OH (Hyp) группами  $\alpha$ -цепей коллагена другой тропоколлагеновой молекулы также и слабые водородные связи с CH группами соответствующих молекул, объясняет высокую динамическую устойчивость соосных тропоколлагеновых ассоциатов (агрегатов) в водных растворах.

### Литература:

1. Okuyama K., Miyama K., Mizuno K., Bächinger H.P. (2012), Crystal structure of (Gly-Pro-Hyp)(9) : implications for the collagen molecular model, *Biopolymers*, 97, pp. 607-616.

2. Schmid N., Eichenberger A.P., Choutko A., Riniker S., Winger M., Mark A.E., van Gunsteren W.F. (2011), Definition and testing of the GROMOS force-field versions 54A7 and 54B7 , *Eur Biophys J.*, 40, pp. 843-856.

## ОДЕРЖАННЯ ФОСФАТНИХ ХАРЧОВИХ ДОБАВОК

Малахова К.В., Меджидова Е.К., Ніколенко Н.В.

ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»

49005 м. Дніпропетровськ, пр. Гагаріна, 8

[katrin30.01.92@gmail.com](mailto:katrin30.01.92@gmail.com)

У роботі розраховані діаграми розчинності осадів  $\text{Ca}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2$ ,  $\text{CaHPO}_4$  та  $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ . Для експериментальної перевірки результатів розрахунків синтезовані осадки фосфатів кальцію при різних рН розчинів. Фазовий склад таких осадків досліджували методом РФА. Зроблено висновок, що склад осадків залежить, насамперед, від таких умов синтезу, як рН розчину і співвідношення вмісту кальцію і фосфат-іонів в реакційних сумішах.

На сьогоднішній день ринок харчових добавок пропонує широкий асортимент фосфатвмісних препаратів, які являють собою як окремі фосфати, так і різні їх комбінації [1]. Основними споживачами таких харчових добавок є високотехнологічні галузі харчової промисловості: м'ясопереробна, молочна, масложирова, кондитерська, хлібопекарська, а також виробництва безалкогольних напоїв, рибопродуктів та харчових концентратів. Їх додавання призводить до збільшення вологозв'язуючої здатності білків, що збільшує вихід готової продукції, скорочує втрати і перенесення вологи при розморожуванні і термічній обробці, скорочує тривалість засолу, поліпшує текстуру і консистенцію, колір і смак готових м'ясо- і рибопродуктів, сповільнює окиснення жирів.

В Україні відсутні родовища високоякісної фосфорної сировини. Проте у багатьох країнах використовують сировину зі збіднених родовищ для виробництва фосфатів. Наприклад, у Бразилії використовують фосфорити з середнім вмістом  $\text{P}_2\text{O}_5$  5-12 мас.%, у Швеції – 1,5-2,0 мас.%  $\text{P}_2\text{O}_5$ , Фінляндії – 3,3-4,0 мас.%  $\text{P}_2\text{O}_5$ . Оскільки потреба в таких фосфатах безперервно зростає, то становить інтерес організувати в Україні виробництво харчових фосфатів на основі власних фосфоритів.

На сьогодні в Україні є розроблені технології для отримання фосфатвмісних добрив зі збіднених родовищ фосфатної руди методом азотно-кислотного розкладання [2]. Але, як відомо, до складу харчових добавок пред'являються підвищені вимоги по вмісту в них таких шкідливих для організму домішок як флуору, арсену, важких металів (свинцю, цинку та ін.). Аналіз