

ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРИ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ САХАРИДІВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Комп'ютерне молекулярне моделювання є науковим напрямом, який швидко розвивається та широко використовується при пошуку нових лікарських препаратів і фізіологічно активних сполук. Також є основи припускати, що цей напрям є перспективним з приводу конструювання продуктів харчування із заданими властивостями. В останні роки розвиток комп'ютерної техніки досяг рівня при якому звичайний персональний комп'ютер дозволяє розв'язувати задачі, розв'язання яких років 20 тому вважалося неможливим. Однією з таких задач є моделювання методом молекулярної динаміки систем, що складаються з великої кількості частинок.

В будь-якому харчовому продукті присутні вуглеводи, які або містяться у сировині, або додаються для придання відповідному продукту смакових та інших властивостей. Також в харчових продуктах обов'язково присутня вода. Тому вважається доцільним дослідження структури та поведінки води в присутності вуглеводів. З цією метою досліджувались модельні розчини сахаридів, зокрема сахарози (рис.1), глюкози (рис. 2) та фруктози (рис. 3), у воді. Наявність в цих сахаридів великої кількості груп OH свідчить про їх активну взаємодію з молекулами води.

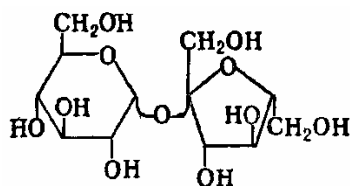


Рисунок 1 - Структурна формула сахарози

На попередньому етапі водні розчини сахарози, глюкози та фруктози різної концентрації досліджувались методом молекулярної динаміки. Для цього використовувалась програма GROMACS. Конфігурації молекул зазначених вище сахаридів отримані за використанням програми PRODRG і адаптовані для використання програмою GROMACS. Початкові конфігурації розчинів сахаридів отримані засобами, що передбачені у програмі GROMACS.

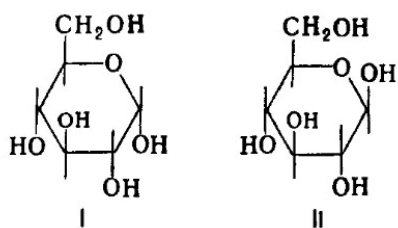


Рисунок 2 - Структурні формули глюкози (I - α -D-глюкопіраноза, II - β -D-глюкопіраноза)

Моделювались системи, що відповідають 5%, 10%, 15% і 30% водним розчинам сахаридів. Чисельний експеримент проводився за температур 275 К, 280 К, 290 К, 300 К, 310 К, 325 К, 350 К і 370 К за умови нормального тиску. Також для порівняння результатів було проведено моделювання чистої води за таких самих температур. Для цього було взято кубічну комірку з ребром 3,13 нм, яка містить 1022 молекули води.

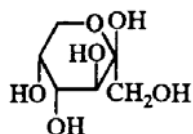


Рисунок 2 - Структурні формули фруктози

Вихідні конфігурації, які відповідають системам, що було досліджено, створено засобами які є в програмі GROMACS. Попередньо системи було приведено у рівноважний стан мінімізацією енергії за допомогою короткого молекулярно-динамічного розрахунку. Повне моделювання методом молекулярної динаміки проводилося з шагом 0,001 пікосекунди. Координати атомів системи записувались в файл через 500 шагів, тобто кожні 0,5 пс. Розрахунковий час при моделюванні розчинів за кожної температури становив 5000 пс.

Під час обробки результатів було отримано залежності середнього квадрату зміщення центру мас молекул води від часу. Базуючись на цих даних було розраховано коефіцієнти самодифузії води в модельних розчинах сахаридів. Також було розраховано кількість водневих зв'язків, які утворюють сахариди з молекулами води. Ця інформація свідчить про зв'язування води молекулами сахаридів.