

## МОДЕЛЮВАННЯ ВОДНИХ РОЗЧИНІВ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ

Мануєнков Д.О. аспірант; Горяник Д.О. канд. фіз.-мат. наук, доцент

*Державний біотехнологічний університет*

*Проведено комп'ютерне моделювання водного розчину сахарози методом молекулярної динаміки. Отримано дані щодо молекулярної рухливості води у розчині.*

Органічні сполуки, такі як вуглеводи та білки, широко використовуються в харчовій промисловості в якості структуроутворювачів, піноутворювачів та надання продуктам певних властивостей та смаків. Молекули цих сполук містять велику кількість груп ОН, що призводить до активної взаємодії з молекулами води у розчинах та утворенню великої кількості водневих зв'язків. Сахароза  $C_{12}H_{22}O_{11}$  (рис. 1) є найбільш поширеним вуглеводом, який входить до складу майже всіх рослинних культур та широко застосовується у харчовій промисловості. Це дисахарид, який належить до групи олігосахаридів та складається з двох моносахаридів –  $\alpha$ -глюкози та  $\beta$ -фруктози.

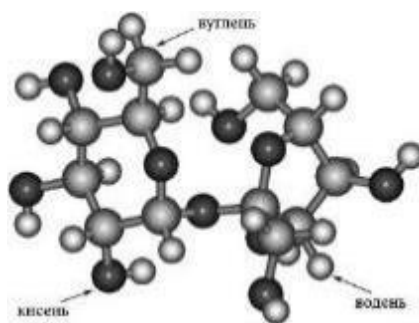


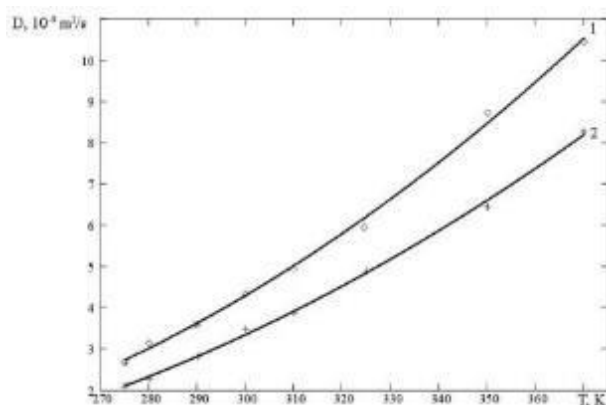
Рис. 1 – Просторова модель молекули сахарози

Водний розчин сахарози моделювався методом молекулярної динаміки. Для розрахунків та обробки результатів використовувалась пакет програм GROMACS. Конфігурація молекули сахарози отримана за використанням програми PRODRG і адаптована для використання в пакеті програм GROMACS.

Проведено моделювання системи, що відповідає 30% водному розчину сахарози. Цій системі відповідає комірка у формі прямокутного паралелепіпеду з ребрами 3,97 нм, 2,97 нм та 3,97 нм, яка містить 27 молекул сахарози та 1228 молекул води. Чисельний експеримент проводився за температур 275 К, 280 К, 290 К, 300 К, 310 К, 325 К, 350 К та 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 містила 1022 молекули води.

Вихідні конфігурації, які відповідають системам, що було змодельовано, створено засобами які є в програмі GROMACS. Попередньо системи було приведено у рівноважний стан мінімізацією енергії за допомогою короткого

Матеріали міжнародної науково-практичної конференції «Молодь і технічний прогрес в АПВ». 2024 молекулярно-динамічного розрахунку. Повне моделювання методом молекулярної динаміки проводилося з шагом 0,001 пікосекунди. Координати атомів системи записувались в файл через кожні 500 кроків, тобто кожні 0,5 пс. Розрахунковий час при моделюванні розчину та чистої води за кожної температури становив 5000 пс.



Концентрації розчину сахарози: 1 – чиста вода, 2 – 30%

Рис. 2 – Залежність коефіцієнта самодифузії від температури

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 та побудовано температурні залежності для розчину сахарози 30 % концентрації та чистої води (рис. 2). Можна побачити, що наявність у розчині молекул сахарози призводить до суттєвого зменшення коефіцієнтів самодифузії для всіх температур. Це свідчить про зв'язування молекулами сахарози молекул води.

Більше інформації про зв'язування води молекулами сахарози дає кількість водневих зв'язків, що утворює сахароза з молекулами води, а також структура гідратної оболонки молекул сахарози та кількість молекул води, з яких вона складається. Цей розрахунок можна виконати на основі файлів координат, які отримано під час комп'ютерного експерименту. Розраховано, що приблизно через 200 пікосекунд кількість молекул гідратної оболонки починає коливатись навколо деякого середнього значення. Аналогічну картину дає розрахунок кількості водневих зв'язків між молекулами сахарози та води.

Таким чином проведене моделювання водного розчину сахарози методом молекулярної динаміки дозволило детально проаналізувати його структуру та оцінити вплив температури на молекулярну рухомість.

### Список використаних джерел

1. Erik Lindahl, Berk Hess and David van der Spoel. GROMACS 3.0: A package for molecular simulation and trajectory analysis // J. Mol. Mod. – 2001. – № 7. – P.306-317.
2. Schuettelkopf A.W. and van Aalten D.M.F. PRODRG – a tool for high-throughput crystallography of protein-ligand complexes // Acta Crystallogr. – 2004. – D60. – P.1355-1363.