

Особенности молекулярной динамики амилозы и амилопектина

Владимир Литвяк¹, Елена Грабовская²

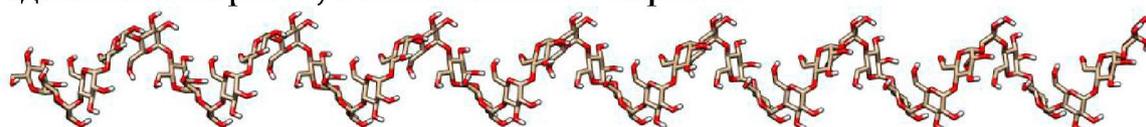
¹Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по продовольствию, Минск, Республика Беларусь

²Национальный университет пищевых технологий, Киев, Украина

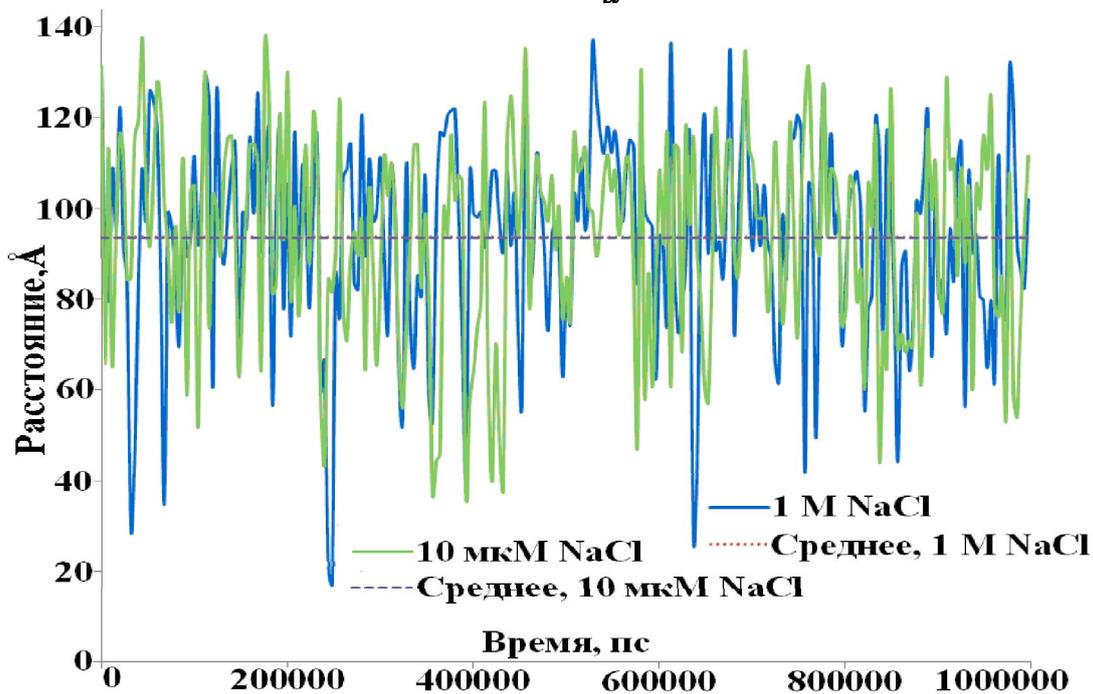
Введение. Молекулярная динамика – вычислительный метод, позволяющий моделировать подвижность химических соединений, от самых простых до супрамолекулярных комплексов массой более 1 МДа.

Материалы и методы. В основе метода молекулярной динамики вычисление изменения положения атомов молекул с течением времени в заданных физических условиях: температура, давление, тип растворителя, ионная сила. Метод молекулярной динамики позволяет моделировать детальную микроскопическую картину внутренней подвижности макромолекулы.

Результаты. Особенности молекулярной динамики амилозы представлены на рис. 1, а амилопектина – на рис. 2.



а



б

Рис. 1. Молекулярная динамика амилозы: а – линейная цепочка амилозы (α -глюкан из 40 остатков); б – сравнение расстояния между атомами O1 восстанавливающего конца и O4 конечного остатка с противоположной стороны цепочки (различие между средними незначимо).

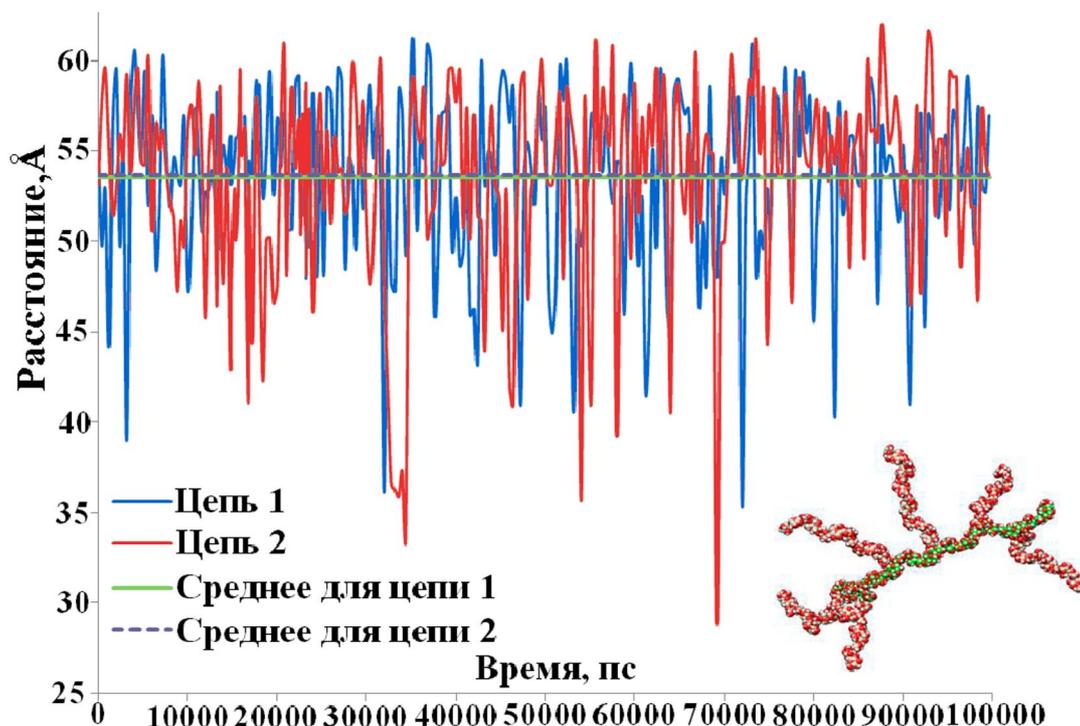


Рис. 2. Расстояния между концами 2 А-цепей амилопектина.

В ходе моделирования молекулярной динамики амилозы, состоящей из 40 остатков глюкопиранозы и имеющей общую длину 117\AA , нами обнаружено, что изолированная цепь амилозы не обладает стабильной структурой. За отрезок в 1 мкс мы пронаблюдали «биение» цепочки и общую конформационную нестабильность структуры расположения звеньев. Ионная сила раствора не оказала влияние на характер движений цепочки.

Увеличение молекулярной массы и ветвление структуры кардинально меняет характер движения отдельных участков цепи. Так, по сравнению с амилозой, амплитуда движений амилопектина, состоящего из одной «якорной» В-цепи из 43 глюкопиранозных остатков и 6 боковых А-цепей из 16 остатков глюкопиранозы, намного более узкая.

Квантово-химические расчеты молекулярной динамики проводились на кластерном суперкомпьютере СКИФ-ОИПИ (Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси).

Выводы. Таким образом, на основании сравнительных исследований молекулярной динамики можно сделать предположение, что амилоза является разрыхляющим фактором крахмальной гранулы и приводит к образованию аморфных участков в ней, а амилопектин, напротив, способствует формированию кристаллических участков.