

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ НАН УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
"ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"

ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. Івана Франка

ЛЬВІВСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ім. Данила Галицького

НАУКОВЕ ТОВАРИСТВО ім. Тараса Шевченка
УКРАЇНСЬКЕ ХІМІЧНЕ ТОВАРИСТВО

ХІХ УКРАЇНСЬКА КОНФЕРЕНЦІЯ З ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Львів, 10 – 14 вересня 2001 р.

Львів

Видавництво Національного університету "Львівська політехніка"

2001

ВИВЧЕННЯ ПРОСТОРОВОЇ БУДОВИ КРОХМАЛЮ МЕТОДАМИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ХІМІЇ

Качковський О.О., Грабовська О.В., Штангеева Н.І., Дегтярьов Л.С.

Український державний університет харчових технологій

01033 Україна, м. Київ, вул. Володимирська, 68

тел. (044) 221-97-12

E-mail: starch@usuft.kiev.ua

Конформаційний та конфігураційний аналіз ланцюгів амілози та амілопектину проведено методами комп'ютерної хімії.

Відтворено поверхні потенціальних енергій димерів із двох глюкозних одиниць з α -1,4 та α -1,6 глюкозидними зв'язками методом молекулярної механіки в наближенні ММ3 та квантово-хімічним методом в параметризації РМ3 у всьому діапазоні змін торсійних кутів Φ , Ψ та Ω від -180° до $+180^\circ$, де: $\Phi = O_5-C_1-O-C^1_x$, $\Psi = C_1-O-C^1_x-C^1_{(x-1)}$ для α -(1 \rightarrow x) зв'язку, а $\Omega = C_5-C_6$ в α -1,6 зв'язку.

Встановлено регіони можливих конформацій. Відповідні регіони досліджено з меншим кроком торсійних кутів та повною оптимізацією молекулярної геометрії. На основі отриманих даних побудовано просторові та контурні карти змін енергії як функції відносної орієнтації глюкозних одиниць, що показують форму і розміщення мінімумів енергії, шляхи інтерконверсії між конформерами та висоти транзитних бар'єрів.

Досліджено вплив розгалужень α -1,6 на просторову будову молекул амілопектину та амілози. Так, показано, що незначна кількість розгалужень, що можуть бути присутні в амілозі (в середньому два на 80-100 ангідроглюкозних одиниць) порушують стереорегулярність спіралей амілози.

Встановлено орієнтацію первинних ОН груп (при вуглеці C_6) та вторинних (при C_2 , C_3 та C_4).