

Оцінка стабільності та реакційної здатності молекули лізину методами комп'ютерної хімії

*Стеценко Наталія Олександрівна,
к.х.н., доцент кафедри технології оздоровчих продуктів
Національного університету харчових технологій*

*Сімахіна Галина Олександрівна,
д.т.н., професор, завідувач кафедри технології оздоровчих продуктів
Національного університету харчових технологій*

Біологічно активні речовини є природними та необхідними компонентами харчових продуктів. Вивчення їх будови і властивостей – одне з важливих завдань, що дозволяє розробляти принципи конструювання нових харчових продуктів оздоровчого і профілактичного призначення. Будова сполук, їх властивості і реакційна здатність визначають механізми перетворень, що відбуваються у технологічних процесах. Тому на сучасному етапі розвитку науки необхідно враховувати ці знання при створенні нових корисних фізіологічно функціональних інгредієнтів, розробленні новітніх технологій харчових продуктів оздоровчої дії.

Комп'ютерна хімія – це інформативний метод отримання даних щодо будови і властивостей речовин, який ґрунтується на використанні математичних методів для обчислення параметрів молекулярних структур, фізико-хімічних властивостей та реакційної здатності хімічних сполук [1].

В основі комп'ютерної хімії знаходяться три потужних комплекси методів: метод молекулярної механіки, молекулярної динаміки, а також квантової хімії. Методи молекулярної механіки і квантової хімії суттєво відрізняються між собою. Перший ґрунтується на законах пружності, які описують взаємодії, що приводять до поєднання атомів в молекулі, а другий – на електронно-ядерній будові атомів, тобто на кулонівських взаємодіях електронів і ядер. В основі молекулярної динаміки знаходяться закони класичної механіки. В квантової хімії модель молекули – це сукупність ядер і електронів, що підкоряється законам квантової механіки. У молекулярній

механіці та сама молекула розглядається як сукупність атомів, взаємодія яких задається, як правило, за допомогою емпіричних потенціалів.

На даному етапі розвитку галузь знань, яка отримала назву комп'ютерна хімія, не обмежується лише квантово-хімічними розрахунками і включає широке коло теоретичних методів, в тому числі різноманітні методи розрахунку фізико-хімічних властивостей речовин, бази даних, чисельне моделювання статистичних характеристик і динаміки хімічних процесів. Найбільш теоретично розробленими з них є візуалізація просторової будови молекул; прогнозування фізико-хімічних властивостей органічних сполук на основі аналізу їх хімічної будови та системи управління базами даних хімічних сполук; квантова хімія; методи розрахунку геометричної будови, статистичних характеристик та динаміки молекул, що базуються на класичній механіці: молекулярна механіка, молекулярна динаміка тощо [2].

Для використання методів комп'ютерної хімії розроблені спеціалізовані програмні пакети, одним з яких є пакет HyperChem. В ньому реалізовані всі сучасні методи комп'ютерної хімії, включаючи неемпіричні та напівемпіричні квантово-хімічні методи, молекулярну механіку, молекулярну динаміку, метод Монте-Карло. Для кожного метода є набір різних параметризацій, який дозволяє досліднику варіювати вибір варіанта постановки задач залежно від мети досліджень та можливостей обчислювальної техніки.

На властивості та реакційну здатність біологічно активних речовин суттєво впливає їхня просторова будова. Методи молекулярної механіки, квантової хімії дають можливість розрахувати геометричні параметри молекул та їхні енергетичні характеристики, які будуть адекватні експериментальним даним.

Метою роботи є визначення та порівняння просторової будови, енергетичних характеристик та реакційної здатності незамінної амінокислоти лізину, який є однією з найбільш дефіцитних речовин в складі багатьох білків харчових продуктів, зокрема зернових культур.

Було досліджено просторову та електронну будову молекули лізину, яка може знаходитися у вигляді нейтральної, позитивно та негативно зарядженої частинки, а також гідратованої сполуки. Для цього застосовували програмний пакет HyperChem.

На першому етапі досліджень вирішується завдання редагування структурних формул хімічних сполук, їх візуалізація та отримання трьохвимірних моделей. Структурна формула та трьохвимірна модель молекули лізину наведені на рис.1 та рис. 2 відповідно.

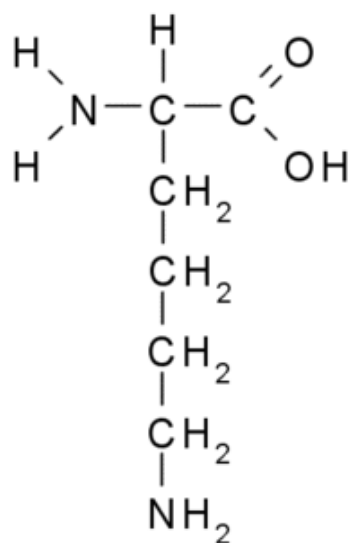


Рисунок 1. Структурна формула молекули лізину

Завдання комп'ютерної програми, яка реалізує методи молекулярної механіки та квантової хімії, полягає у розрахунку енергетичних характеристик молекули та у знаходженні її найбільш оптимальної геометричної будови шляхом пошуку мінімального значення енергії залежно від координат атомів.

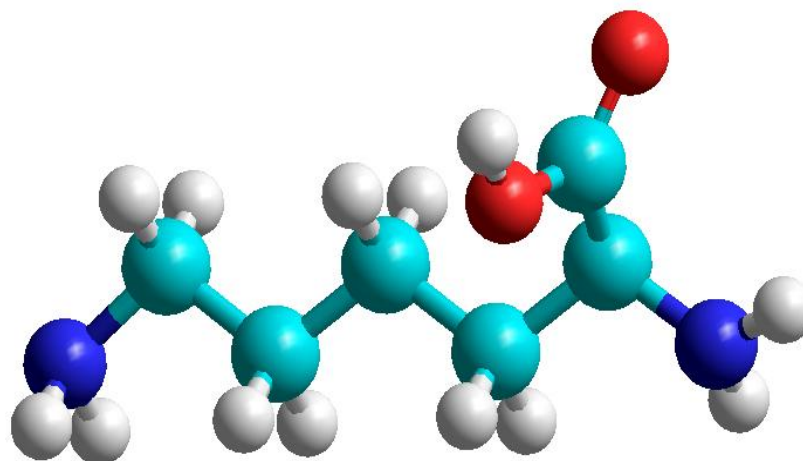


Рисунок 2. Трьохвимірна модель молекули лізину

Було встановлено просторову будову та проведено розрахунки енергетичних характеристик молекули лізину у вигляді нейтральної, позитивно та негативно зарядженої частинки та гідратованої сполуки. Значення загальної енергії та її складових для молекулярних структур наведено в табл. 1.

Таблиця 1. Енергетичні характеристики молекули лізину

Енергетичні характеристики, ккал/моль	Нейтральна	Катіон	Аніон
Загальна енергія	-2,998	-1,618	3,202
Енергія зв'язків	0,325	0,345	0,286
Енергія кутів	1,324	1,546	0,916
Енергія просторових кутів	2,975	2,517	1,019
Ван-дер-Ваальсові взаємодії	2,923	3,090	2,358
Просторові напруження	0,120	0,123	0,116
Електростатичні взаємодії	-4,716	-4,206	-1,495

З наведених даних можна зробити висновки, що у вакуумі найбільш стабільною є нейтральна молекула, про що свідчить мінімальне значення загальної енергії даної структури. Загальна енергія обумовлена Ван-дер-

Ваальсовими, електростатичними взаємодіями та енергією просторових кутів. При переході від нейтральної сполуки до заряджених частинок загальна енергія зростає, що свідчить про зменшення стабільності та підвищення реакційної здатності катіону та аніону.

В харчових продуктах амінокислоти можуть знаходитися у водних розчинах. Тому важливо визначити та порівняти енергетичні характеристики молекули лізину в газовому та водному середовищах. Для оцінювання стабільності провели моделювання взаємодії молекули лізину з диполями води. Результати розрахунків наведено в табл. 2.

Таблиця 2. Порівняння енергетичних характеристик молекули лізину у воді та вакуумі

Енергетичні характеристики, ккал/моль	Нейтральна		Катіон		Аніон	
	вакуум	вода	вакуум	вода	вакуум	вода
Загальна енергія	-2,998	-579,833	-1,618	-564,84	3,202	566,14
Енергія зв'язків	0,325	0,355	0,345	0,398	0,286	0,337
Енергія кутів	1,324	5,379	1,546	5,406	0,916	5,136
Енергія просторових кутів	2,975	-2,628	2,517	0,930	1,019	0,897
Ван-дер-Ваальсові взаємодії	2,923	-172,833	3,090	-167,509	2,358	-168,315
Просторові напруження	0,120	0,011	0,123	0,034	0,116	0,036
Електростатичні взаємодії	-4,716	-410,119	-4,206	-404,102	-1,495	-404,24

Аналіз отриманих даних показує, що гідратовані сполуки значно стабільніші ніж молекули, які знаходяться у газовому середовищі. Загальна енергія нейтральної сполуки у вакуумі становить (-2,998) ккал/моль, а у воді – (-579,834) ккал/моль. Це обумовлено зменшенням значень енергії Ван-дер-Ваальсових, електростатичних взаємодій та енергії просторових кутів. Отже,

у водному середовищі досліджені молекулярні структури проявляють меншу реакційну здатність.

Дослідження енергетичних характеристик молекули лізину показало, що найбільш стабільною структурою є нейтральна, а реакційноздатною – аніон. Порівняння енергетичних характеристик молекул у вакуумі та у воді показує, що водне середовище сприяє стабільності утворених сполук.

Список використаної літератури:

1. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView/ Е.В. Бутырская. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 244 с.
2. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: Химия, 2007. – 536 с.