

Российская Академия Наук
Отделение общей и технической химии
Институт биохимической физики РАН им. Н. М. Эмануэля
Российская Академия Сельскохозяйственных Наук
Всероссийский научно-исследовательский институт
крахмалопродуктов РАСХН
Ассоциация российских производителей
крахмалопаточной продукции «Роскрахмалпатока»
Министерство Промышленности, Науки и Технологий РФ
Министерство Сельского хозяйства РФ
Институт Перерабатывающей Промышленности

I-ая Московская Международная Конференция

*«Крахмал и Крахмалсодержащие
Источники — Структура, Свойства
и Новые Технологии»*



Москва
30 Октября — 1 Ноября, 2001

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИСАХАРИДОВ КРАХМАЛА МЕТОДАМИ КР-СПЕКТРОСКОПИИ И КОМПЬЮТЕРНОЙ ХИМИИ

*Грабовская Е. В., Качковский А. А., Штангеева Н. И., Климович В. М.,
Дегтярев Л. С., Гулый И. С., Украинец А. И.*

Украинский государственный университет пищевых технологий
Украина, г. Киев, ул. Владимирская 68,
E-mail: starch@usuft.kiev.ua

Исследования конформационных изменений макромолекул полисахаридов крахмала проводили с помощью лазерного Raman-спектрометра в диапазоне длин волн от 3500 до 800 см⁻¹. Установлены изменения в спектрах образцов, полученных клейстеризацией суспензии крахмала при разных значениях рН. Изменения интенсивности полос при переходе от кислых сред к щелочным свидетельствуют о внутримолекулярных превращениях, связанных с перестраиванием водородных связей и изменением конформации макромолекул. Спектры КР позволяют оценить влияние технологических процессов переработки крахмала на структурные изменения крахмальных полисахаридов.

Ввиду противоречивости существующих данных по конформационному анализу структуры амилозы, нами были рассчитаны карты конформационной энергии квантово-химическим методом в параметризации РМЗ и методом молекулярной механики в параметризации ММ+. Сравнительный анализ результатов показал удовлетворительную корреляцию, после чего были уточнены соответствующие регионы с полной оптимизацией геометрии.

Расчеты проведены для димера вращением по ϕ и ψ гликозидным связям (где ϕ — C_1-O_g , а ψ — O_g-C_4). Изменения конформационной энергии отслеживались в зависимости от изменения торсионных углов $O-C_1-O_g-C_4'$ и $C_1-O_g-C_4'-C_3'$ (атомы со штрихом относятся ко второму пиранозному кольцу) во всем диапазоне от -180° до $+180^\circ$. На основании полученных данных предложены карты зависимости потенциальной энергии $U(\phi, \psi)$. Исследовали влияние разветвлений на конфигурацию цепей амилозы. Показано, что даже незначительная степень разветвлений, которая может быть присуща амилозе, способна нарушать стереорегулярность ее цепей.

INVESTIGATION OF STARCH POLYSACCHARIDES STRUCTURES BY METHODS OF RAMAN SPECTRA AND COMPUTER CHEMISTRY

2

*Grabovskaya E.V., Kachkovsky A.A., Shtangeeva N.I., Klimovich V.M.,
Degtyaryov L.S., Goulyi I.S., Ukrainets A.I.*

The Ukrainian State University of food technologies
Ukraine, Kiev, street Vladimirskaia 68,
E-mail: starch@usuft.kiev.ua

The researches of conformation changes of starches polysaccharides macromolecules carried out with the help of laser Raman-spectrometer in a range of waves from 3500 up to 800 cm^{-1} . We studied the spectra of samples obtained of gelation the starch suspension at different pH values are established. The changes of lines intensity at transferring from acid environments to alkaline, testify to intramolecular transformations connected with reconstruction of hydrogen bonds and changes of macromolecules conformation. The spectrums of combination scattering allow to estimate influence of starch technology on structural changes of starch polysaccharides.

In view of discrepancy of the existing data on conformation to the analysis of structure amylose, we designed cards of conformations energy by a semi-empirical method PM3 and the molecular mechanics method in parametrization MM+. The comparative analysis of results has shown satisfactory correlation, then the appropriate regions with complete geometry optimization were specified.

Calculate are carried out for dimer by rotation on Φ and ψ of glucosidic links (where Φ — $\text{C}_1\text{-O}_g$, and $\psi\text{-O}_g\text{-C}_4$). The changes of conformations energy were traced depending on change torsion angles $\text{O-C}_1\text{-O}_g\text{-C}_4'$ and $\text{C}_1\text{-O}_g\text{-C}_4'\text{-C}_3'$ (the atoms with a stroke concern to a second pyranosyl ring) in all range from -180° up to $+180^\circ$. On the basis of the obtained data the cards of dependence of potential energy $U(\Phi, \psi)$ and reference of regions with minima of energy are offered.

Investigated influence of branchings on a configuration of chains amylose. So, is shown, what even the insignificant degree of branchings, which can be inherent the amylose, is capable to break a stereoregularity of chains amylose.