

# **1. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ СЛИВОЧНОГО МАСЛА**

**Т. А. Рашевская**

**С. В. Иванов**

**В. И. Шаповал**

*Национальный университет пищевых технологий*

С начала 20 века, когда человечеству открылся удивительный мир квантовой механики, стало известно, что пространственные размеры атомов задают естественный универсальный субнанометровый масштаб строения

вещества. Нанометровый масштаб задают компактные ядерно-электронные мультичастицы, образующие наноструктуру материалов. Изучение наноструктуры сливочного масла на сегодня особенно актуально в связи с развитием нанотехнологий и ростом потребностей населения в функциональных продуктах. Реализация нанотехнологий требует глубоких знаний о функционировании сложных наноструктурных систем, к которым относится сливочное масло, и процессов их молекулярной самоорганизации. Для описания структурных, динамических кинетических свойств молекулярных или атомных систем широко используется метод молекулярной динамики (МД), суть которого состоит в нахождении траектории молекул в соответствии с заданными свойствами межмолекулярного взаимодействия, то есть получении последовательности состояний молекулярной системы на протяжении определенного времени. С помощью МД определяется структура и энергия, напряжения различных дефектов: вакансий и межузельных атомов, дислокаций, границ зерен и т.д. Продолжающееся развитие межатомных потенциалов позволяет изучать эти дефекты с новой степенью подробности и точности. Изучение фазовых превращений, в том числе между агрегатными состояниями одного и того же вещества, построение фазовых диаграмм – одно из направлений применения МД.

В нашем университете разработан целый ряд функциональных видов сливочного масла, в том числе с инулином, который имеет ярко выраженные лечебно-профилактические свойства. Его рекомендуют применять при болезнях сердца, почечно-каменных, при сахарном диабете, ожирении (инулин может выступать как заменитель жира), иммунодефиците. С помощью программ ChemDraw и ChemBio3D была смоделирована атомная структура молекулы инулина. С помощью метода МД провели расчет оптимальной конформации молекулы – координат атомов, при которых молекулярная система имеет наименьшее значение энергии ( $E$ ). Установленная  $E = 89,9696$  ккал/моль. Найдена пространственная структура атомов, соответствующих данной энергии. Для более точных данных необходимы дополнительные исследования.

Отрасль нанотехнологий является, вероятно, одним из самых ярких примеров того, как моделирование не только позволяет выяснять важные детали о структуре материалов, динамике химических процессов и т.п., но и фактически направляет развитие науки. Именно с помощью квантово-химических расчётов за 12 лет до экспериментальной расшифровки структуры была продемонстрирована стабильность фуллеренов. Метод МД даст нам новые перспективы в изучении наноструктуры сливочного масла.