

ФГБОУ ВО Ставропольский государственный аграрный университет

**Омаров Руслан Сафербегович,
доцент**

**ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ
МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МЯСНЫХ
ПРОДУКТОВ**

АННОТАЦИЯ

Методами молекулярного анализа подтверждена целесообразность комплексного использования молочного белково-углеводного и мясного сырья, т.к. при комплексном его использовании происходит снижение энергии, система стабилизируется, что приводит к улучшению ФТС мясопродуктов. На основании моделирования процесса термической обработки и анализа физико-химических и термодинамических свойств молекул α -казеина, лактоглобулина и миозина установлено, что общая энергия этих компонентов в комплексе ниже, чем в автономном состоянии ($\Delta E = 3175,1$ ккал/моль), что свидетельствует о стабилизации системы. Введение лактулозы не оказывает существенного влияния на общую энергию комплекса. Анализ пространственной структуры после термической обработки выявил диффузию молекул лактулозы и воды в белковый комплекс без разрыва ковалентных связей.

Ключевые слова: молекулы белков, лактулоза, α -казеин, миозин

ВВЕДЕНИЕ

К настоящему времени синтезированы десятки миллионов органических соединений различной химической структуры. Практическое применение из них находят десятки тысяч веществ. Каждое соединение имеет свои характерные физико-химические свойства. Однако далеко не для всех соединений имеются надежно определенные экспериментальные значения различных свойств. Поэтому чрезвычайно важная задача нахождения количественных корреляционных зависимостей между структурой и свойствами химических соединений. Установление таких зависимостей позволит не только быстро выбрать из имеющихся соединений наиболее желательное, но и определить направление синтеза новых соединений. Метод молекулярной механики может быть использован для исследования систем, включающих несколько тысяч атомов, таких, как олигомеры, белки и полисахариды. С его применением решаются задачи конформационного анализа: поиск стабильных состояний путем минимизации энергии молекулярной системы. Компьютерная химия не ограничивается только квантово-химическими расчетами и включает широкий круг различных эмпирических и полуэмпирических методов определения физико-химических свойств веществ, базирующихся на применении методов искусственного интеллекта, в том числе нейронных сетей, базы данных, численного моделирования статистических характеристик и динамики химических процессов. Визуализация пространственной структуры молекул и расчет их геометрического строения позволят осуществить прогноз физико-химических свойств органических соединений.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

При моделировании молекулярных структур определялись общая энергия, дипольный момент и среднеквадратичный градиент. Дипольный момент отображает изменения как статических, так и динамических параметров молекул.

Используя модуль ланжевендовской динамики в приложении HyperChem v. 7.1, выполнено моделирование процесса термической обработки α -казеина, лактоглобулина, миозина и системы этих белков при 72°C, что соответствует технологическим режимам вареных колбасных изделий. Процесс имитации обработки компонентов в воде осуществлялся в модуле Periodic boundary conditions (периодические граничные условия). Смысл периодических граничных условий в молекулярной динамике состоит в том, что с помощью данного метода решается проблема моделирования системы, включающей большое число молекул воды. После термической обработки каждой молекулы в воде снималась общая энергия, дипольный момент и среднеквадратичный градиент.

Процесс имитации обработки компонентов в воде осуществляли методом ланжевендовской динамики в модуле Periodic boundary conditions (периодические граничные условия). Смысл периодических граничных условий состоит в том, что с помощью данного метода решается проблема моделирования системы, включающей большое число молекул воды.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

По окончании процесса моделирования α -казеина (Рис. 1, 2), лактоальбумина, и миозина отмечено незначительное изменение конформации исследуемых молекул.

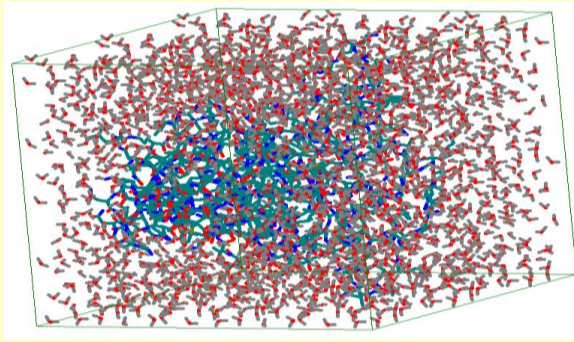


Рисунок 1: Ячейка периодичности с молекулой α -казеина до термической обработки

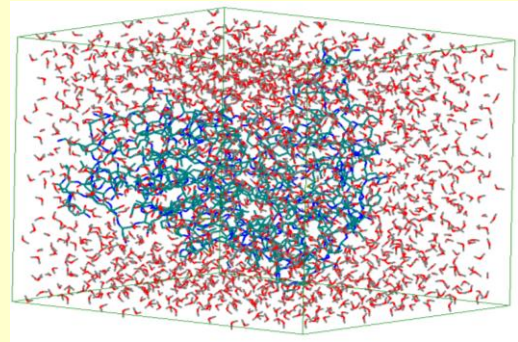


Рисунок 2: Ячейка периодичности, с молекулой α -казеина после термической обработки

В результате термической обработки в воде α -казеина образуется пространственная сетчатая структура, в ячейках которой и за ее пределами расположены молекулы воды. Кроме этого, в процессе модификации не происходило разрушение внутримолекулярных связей анализируемых фрагментов.

При моделировании процесса термической обработки лактоглобулина в воде (Рис. 3, 4) также наблюдали незначительное изменение конформации системы с образованием пространственной структуры по всему объему гидратной ячейки.

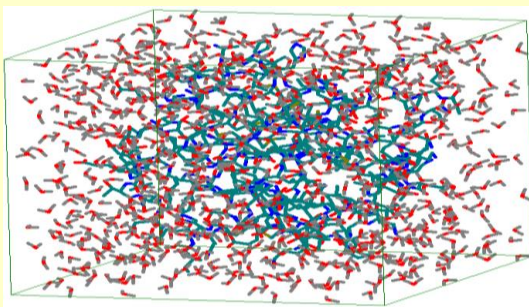


Рисунок 3: Ячейка периодичности с молекулой лактоглобулина до термической обработки

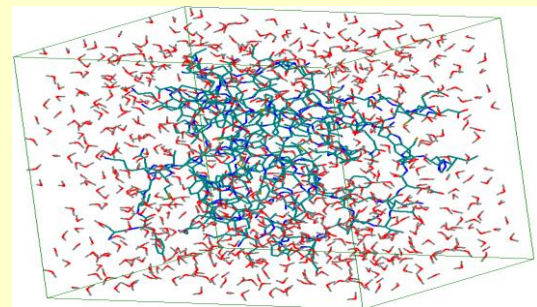


Рисунок 4: Ячейка периодичности с молекулой лактоглобулина после термической обработки

После процесса компьютерного моделирования термической обработки миозина в воде (Рис. 5, 6) отмечено более значимое изменение конформации системы.

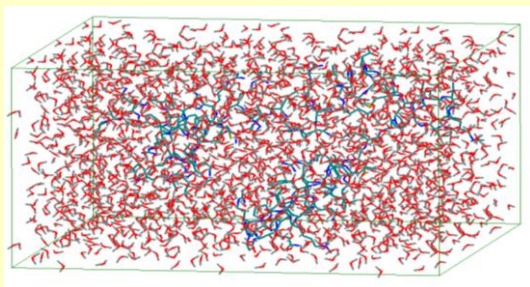


Рисунок 5: Ячейка периодичности с молекулой миозина до термической обработки

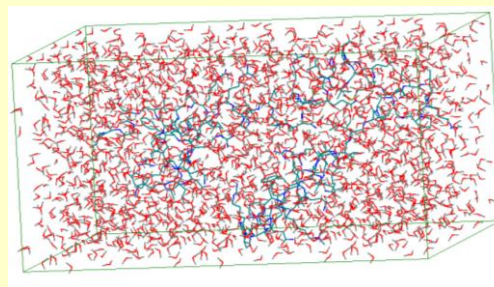


Рисунок 6: Ячейка периодичности с молекулой миозина после термической обработки

Проведенный анализ процесса (Таблица 1) термической обработки белковых молекул α -казеина, лактоглобулина и миозина в воде показал, что происходит снижение общей энергии без разрушения ковалентных связей.

Таблица 1: Некоторые физико-химические свойства систем α -казеин-вода, лактоглобулин-вода и миозин-вода

Система	Суммарная энергия, ккал/моль	Дипольный момент, Дебай	Среднеквадратичный градиент, ккал/Åхмоль)
α -Казеин-вода	13945,1	74,3	18,9
Лактоглобулин-вода	6865,7	46,6	19,7
Миозин-вода	9027,4	69,1	16,4

По величине дипольного момента можно предположить образование водородных связей, а среднеквадратичный градиент свидетельствовал об эффективно выполненной процедуре компьютерного моделирования.

На основании проведенного анализа принято решение рассмотреть молекулярные свойства этих соединений в комплексе, белковую систему молекул α -казеина, лактоглобулина и миозина помещали в модуль периодических граничных условий и проводили ее геометрическую оптимизацию (Рис. 7, 8).

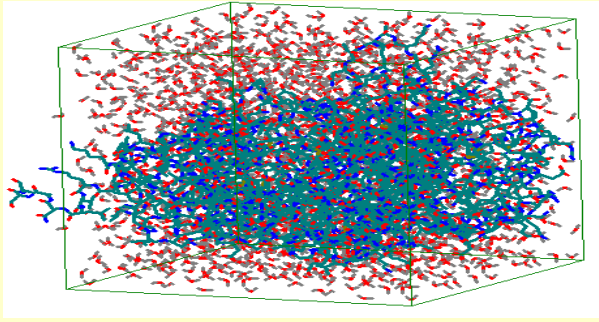


Рисунок 7: Ячейка периодичности с белковой системой до геометрической оптимизации

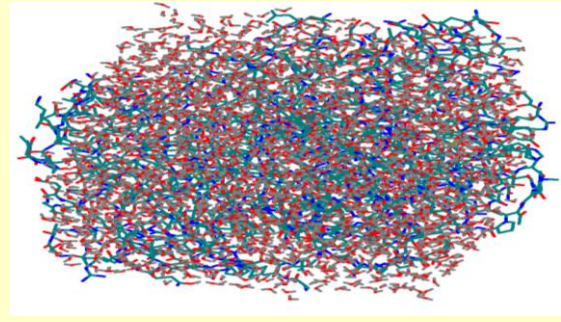


Рисунок 8: Ячейка периодичности с белковой системой после геометрической оптимизации

После геометрической оптимизации менялась конформация системы. С помощью модуля ланжевенковской динамики определены термодинамические и физико-химические свойства системы - энергия составила 26663,1 ккал/ моль, что ниже суммарной энергии систем в автономном состоянии ($\Sigma E = 29838,2$ ккал/моль).

Данный результат свидетельствует, что комплексное использование этих компонентов способствует снижению энергии и стабилизации системы в целом.

В связи с тем, что в рецептурах разрабатываемых продуктов предполагается использование лактулозы, обладающей бифидогенными свойствами, определено ее влияние на физико-химические свойства белковой системы. Количество добавляемой лактулозы составляло 3 % от молекулярной массы белкового комплекса. Как и в предыдущем случае, проводили геометрическую оптимизацию, а затем имитацию термической обработки в модуле ланжевенковской динамики (Рис. 9, 10).

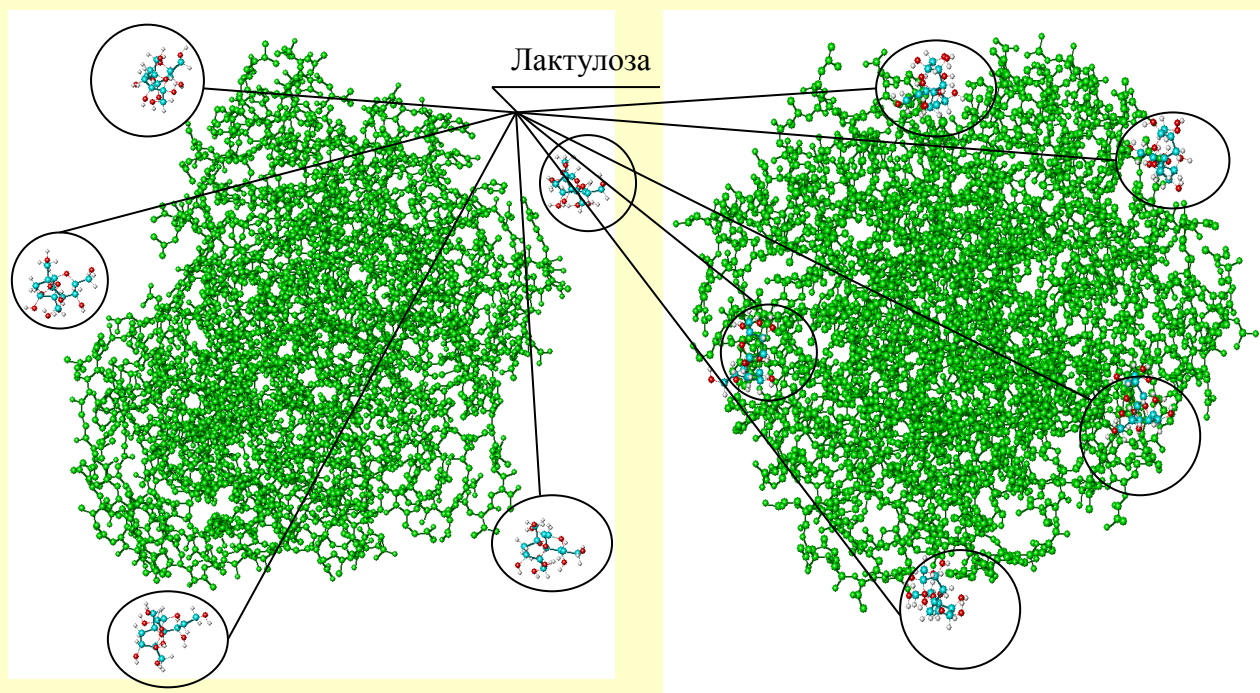


Рисунок 9: Ячейка периодичности с белковой системой до геометрической оптимизации

Рисунок 10: Ячейка периодичности с белковой системой после геометрической оптимизации

Анализ конфигурации системы (Рис. 9, 10) показал, что при термической обработке происходит диффузия лактулозы в молекулу белка, однако при этом не происходит химической реакции. Лактулоза сохраняет свою структуру и бифидогенную активность.

Общая энергия комплекса составила 28361,2 ккал/моль, что на 1698,1 ккал/ моль выше, чем у комплекса белков без лактулозы, но на 1477,0 ккал/моль ниже суммарной энергии систем в автономном состоянии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, на основании моделирования процесса термической обработки и анализа физико-химических и термодинамических свойств молекул α -казеина, лактоглобулина и миозина, установлено, что общая энергия этих компонентов в комплексе ниже, чем в автономном состоянии ($\Sigma E = 3175,1$ ккал/моль), что свидетельствует о стабилизации системы. Введение лактулозы не оказывает существенного влияния на общую энергию комплекса. Анализ

пространственной структуры после термической обработки выявил диффузию молекул лактулозы и воды в белковый комплекс без разрыва ковалентных связей.

Результаты компьютерного моделирования могут послужить основой для разработки рецептурных композиций мясопродуктов с молочными белково-углеводными препаратами.

ССЫЛКИ

- [1] Vladimir Vsevolodovich Sadovoy, Sergei Nikolayevich Shlykov, Ruslan Saferbegovich Omarov, and Tatiana Viktorovna Shchedrina. Antioxidant Food Supplement Fortified With Flavonoids. Res J PharmBiol Chem Sci 2014; 5(5):1530-1537.
- [2] Vladimir Ivanovich Trukhachev, Vladimir Vsevolodovich Sadovoy, Sergei Nikolayevich Shlykov, and Ruslan Saferbegovich Omarov. Development of Technology for Food for People with Hypersthenic Body Type. Res J PharmBiol Chem Sci 2015; 6(2):1347-1352.