

# КОНФОРМАЦИОННАЯ ПОДВИЖНОСТЬ МОЛЕКУЛЫ САХАРОЗЫ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

*Дещеня В.И.,\*<sup>1,2</sup> Кондратюк Н.Д.<sup>1,2,3</sup>*

<sup>1</sup>*МФТИ, Долгопрудный, Россия,* <sup>2</sup>*ОИВТ РАН, Москва, Россия,* <sup>3</sup>*НИУ ВШЭ, Москва, Россия*

\**deshchenia.vi@phystech.edu*

Изучение структурных характеристик молекулы сахарозы в воде имеет практическое значение для ряда задач. Конформация молекул и образование водородных связей определяют свойства продуктов в пищевой промышленности, а также возможность стабилизации белка в растворе, что важно для фармацевтической области.

Экспериментальное изучение конформации сахарозы в водном растворе является сложной задачей из-за быстрых структурных изменений. Эффективным инструментом для таких исследований является метод молекулярной динамики. Однако он требует подходящего для системы потенциала, а поиск такового для растворов углеводов ведется до сих пор [2]. За последние пять лет были предложены несколько потенциалов, которые аккуратно воспроизводят взаимодействия в водных растворах моно-, ди- и полисахаридов [2–4].

В работе используется потенциал, который показал хорошую воспроизводимость экспериментальных коэффициентов диффузии и вязкости [4], для исследования конформаций молекулы сахарозы в водном растворе. Было показано наличие нескольких устойчивых конформаций гликозидной связи, что согласуется с более ранними расчетными работами [5]. Показано, что наиболее стабильная конформация ближе всех находится к кристаллической [1], что подтверждается экспериментальными данными [6]. Для каждой конформации рассчитаны времена жизни и выявлены водородные связи, стабилизирующие её.

Исследование поддержано Программой стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021).

- 
1. Brown G.M., Levy H.A. // *Science*. 1963. V. 141, N. 3584. P. 921–923.
  2. Jamali S.H., Westen T., Moulton O.A., Vlught T.J.H. // *J. Chem. Theory Comput.* 2018. V. 14, No. 12. P. 6690–6700.
  3. Lay W.K., Miller M.S., Elcock A.H. // *J. Chem. Theory Comput.* 2016. V. 12, No. 4. P. 1401–1407.
  4. Deshchenya V.I., Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E. // *J. Mol. Liq.* 2022. V. 367. P. 120456.
  5. Xia J., Case D.A. // *Biopolymers*. 2012. V. 97, No. 5. P. 289–302.
  6. Silva D.G.B., Hallwass F., Navarro-Vázquez A. // *Magn Reson Chem.* 2021. V. 59, No. 4. P. 408–413.