

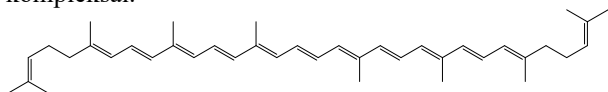
Likopeno su ciklodekstrinu kompleksų Ab initio tyrimas

Lycopene and Cyclodextrins Complexes Ab Initio Study

Goda Bankovskaitė¹, Laurynas Diska¹, Mindaugas Macernis¹

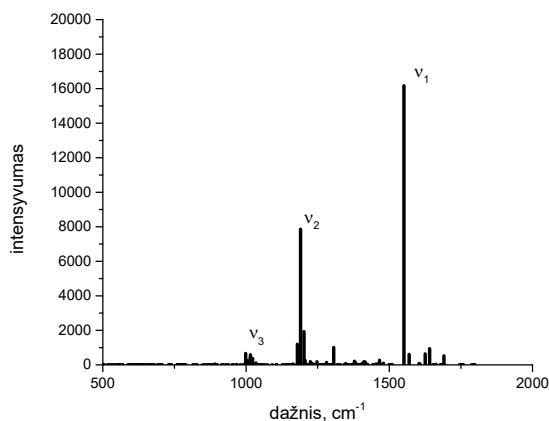
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
goda.bankovskaite@ff.vu.lt

Karotinoidai yra pigmentinės molekulės, kurios suteikia spalvas vaisiams, gėlėms ir gyvūnams, o tai yra pagrindas kompleksiškiems signalizavimo procesams [1,2]. Tuo tarpu fotosintetiniuose organizmuose jei dalyvauja fotonų surinkimo procesuose ir šiuo metu yra nustatyta virš tūkst. skirtingų molekulių rūšių [1]. Karotinoidai yra konjuguoti (1 pav.) ir netirpūs vandenyje, tačiau savybes galima pakeisti, sudarant kompleksus su kitomis molekulėmis, pavyzdžiui, ciklodekstriniais [1]. Karotinoidai turi Ramano spektrą, tipiška sudaryta iš trijų dažnių ν_1 , ν_2 ir ν_3 (pav. 2). Anksčiau buvo nagrinėta ciklodekstrino sąveika su betakarotenu [1], kur Ramano poslinkio savybės susietos su galuose esančias betažiedais. Ramano pokyčiai taip pat stebimi likopeno (1 pav.) su ciklodekstrinu kompleksuose, kur likopeno struktūra yra kitokia (eksperimentiniai duomenys nepublikuoti). Šiame darbe nagrinėjami galimi likopeno ir ciklodekstrino kompleksai.



1 pav. Likopeno cheminė formulė

Skaičiavimai buvo atliekami naudojant AMBER molekulių dinamiką (MD), analizė atlikta su DFT teorijomis: B3LYP ir CAM-B3LYP su cc-pVDZ.

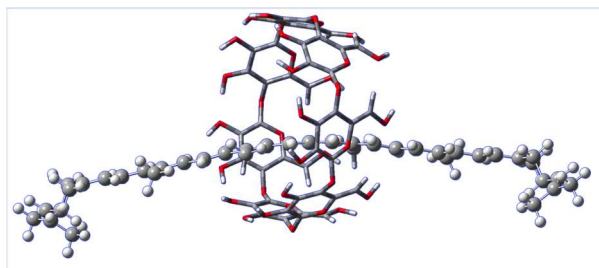


2 pav. Likopeno su ciklodekstrinu Ramano spektras

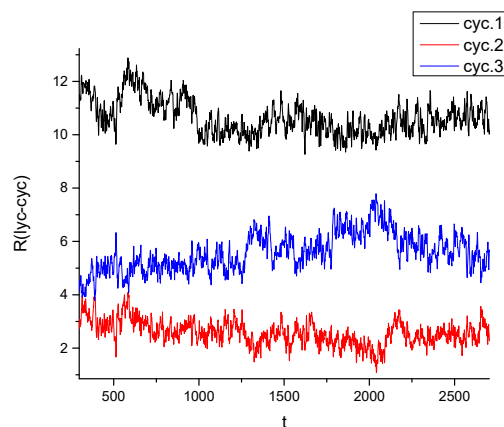
MD simuliacijomis suskaičiuoti kompleksai, kai likopenas yra su 1, 2 ir 3 ciklodekstriniais bei pridėdant vandens molekules ir be jų. Gauta, kad esant mažiau kaip 4 tūkst. vandens molekulių, MD simuliacijos formuoja atskirus vandens klasterius. Ciklodekstrino ir likopeno ryšio energijos ties visomis polieno grandinėlių padėtimis yra apie 0.1 eV. Iš likopeno su ciklodekstrinu

kompleksų (3 pav.) gauti likopeno Ramano spektrai (2 pav.).

MD simuliacijose palygintos RMSD ir masių centro analizės. Pagal masių centro analizę matosi, kiek laiko ciklodekstrinas išbūna ties tam tikra likopeno grandinėlių padėtimi (4 pav.).



3 pav. Likopeno su ciklodekstrinu kompleksas po optimizacijos



4 pav. Likopeno su 3 ciklodekstriniais kompleksu vandens tirpiklyje MD

Reikšminiai žodžiai: molekulių dinamika, kvantinė chemija, superkompiuteris, karotinoidai.

Padėka

Tyrimai finansuoti Lietuvos mokslo tarybos (Nr. S-MIP-23-48). Skaičiavimai buvo atlikti, naudojant superkompiuterį "VU HPC" Saulėtekis, resursais, esančiais Vilniaus universiteto Fizikos fakultete [3].

Literatūra

- [1] M. Macernis, A. Bockuviene, et al. J. Phys. Chem. A **124**, 2792 (2020).
- [2] M. Macernis, S. Streckaitė, R. Litvin et al. J. Phys. Chem. A **126**, 813 (2022).
- [3] M. Macernis, V. Mickus, J. Ahonen et al. arXiv:2210.00934 (2022).