

- на одном либо двух графических ускорителях согласно составлению списка Верле, который составляется согласно списку Верле;
- в гетерогенной вычислительной среде архитектуры N CPU \* 2 GPU.

Исследования показали, что наиболее эффективно графический ускоритель вычисляет невалентные взаимодействия списка пар атомов, построенных по методу Верле. Сам список Верле, с свою очередь, строится по методу сканирования по пространству.

1. A.S. Lemak, N.K. Balabaev. A comparison between collisional dynamics and Brownian dynamics. Mol Simul 15 (1995) 223-31.
2. A.S. Lemak, N.K. Balabaev Molecular dynamics simulation of a polymer chain in solution by collisional dynamics method. J Comp Chem 17 (1996) 1685-95.
3. Н.К. Балабаев, К.В. Шайтан. Компьютерное моделирование молекулярной динамики. В кн.: Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров, М., Издательство ЛКИ, 2009. Глава 2, с.35-62.
4. Glyakina A.V., Likhachev I.V., Balabaev N.K., Galzitskaya O.V. Comparative mechanical unfolding studies of spectrin domains R15, R16 and R17. J Struct Biol. 2018; 201(2):162-170.
5. Glyakina A.V., Likhachev I.V., Balabaev N.K., Galzitskaya O.V. Mechanical stability analysis of the protein L immunoglobulin-binding domain by full alanine screening using molecular dynamics simulations. Biotechnol J. 2015;10(3):386-94.
6. Glyakina A.V., Likhachev I.V., Balabaev N.K., Galzitskaya O.V. Right- and left-handed three-helix proteins. II. Similarity and differences in mechanical unfolding of proteins. Proteins. 2014;82(1):90-102.
7. Лихачев И.В., Балабаев Н.К. // Сборник статей конференции ICMVB-2018. doi: 10.17537/icmbb18.53.

## ФОРМИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРНОЙ ФОСФОЛИПИДНОЙ ФАЗЫ В НАТИВНЫХ МАСЛАХ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

## NANOSTRUCTURED PHOSPHOLIPID PHASE FORMATION IN NATIVE VEGETABLE OILS

*Михаловский И.С., Матвейко Н.П., Мельникова Г.Б.<sup>1</sup>, Бабодей В.Н.<sup>2</sup>, Пчельникова А.В.<sup>2</sup>*

Белорусский государственный экономический университет (кафедра физикохимии материалов и производственных технологий), Минск, jozef\_m@tut.by

<sup>1</sup>Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск

<sup>2</sup>Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по продовольствию, Минск

Получение растительных масел в пищевом виде требует в первую очередь отделения фосфолипидов от масляного сырья [1]. Традиционные технологические процессы с использованием методов гидратации и последующей очистки приводят к образованию на маслодобывающих заводах значительного количества баковых отстоев (фузов), которые, практически, не имеют рентабельного сбыта, а при длительном хранении становятся невостребованными. С потерями фосфолипидов с гидратационным осадком теряются и глицериды ненасыщенных жирных кислот как основная компонента пищевых масел. В этой связи требуются новые подходы к выделению фосфолипидов из нативных масел, в виде пригодном для их практического использования. Известно, что при рафинации растительных масел перспективными являются акустические методы. Так, обработка подсолнечного масла ультразвуком после его гидратации способствует более полному удалению фосфолипидов [2]. Однако при разработке промышленных технологий желательна применение знаний молекулярной биофизики. Амфифильные фосфолипиды в присутствии воды способны образовывать регулярные структуры, что приведет к формированию в масле высокодисперсной фазы суспензионного типа, которая принципиально отличается от традиционной их гидратации с образованием фракции неизвестной природы. Последующее применение центробежных методов, например сепарации позволит получить фосфолипидную фракцию, пригодную для дальнейшего использования. В работе представлены результаты по формированию в масляном сырье фосфолипидных структур как основы суспензионной фазы.

Ультразвуковая обработка с использованием установки ИЛ100-6/1 «ИНЛАБ» (РФ) нативного (нерафинированного) масла, например, рапсового с водой приводит к формированию дисперсии. Для определения структуры дисперсных частиц применили оригинальный подход, основанный на предположении о том, что фосфолипидные дисперсные частицы, сформированные непосредственно в масле сохраняют свою структуру в полярной водной среде. Данный подход позволяет корректно исследовать размерные характеристики частиц, поскольку изучение структур непосредственно в масле является проблемой. Для этого часть фосфолипидных структур с маслом переводили в водную среду, гомогенизировали и центрифугировали с помощью центрифуги Universal 320R «Hettich» (ФРГ) для отделения глицеридной компоненты. Брали дисперсию вдали от границ раздела (с воздухом, стенками пробирки).

Образец дисперсии исследовали методами светорассеяния и атомно-силовой микроскопии (АСМ). Регистрировали спектр светорассеяния  $R(\lambda)$  дисперсии с использованием спектрофотометра CM2203

«Солар» (Беларусь), работающего в режиме спектрофотометра. Затем аппроксимировали спектр зависимостью  $R=a/\lambda^p$  в представлении Ангстрема [3]. Установлено, что в интервале 300 нм – 900 нм наблюдается рэлеевское рассеяние на частицах, спектр хорошо аппроксимируется кривой с показателем  $p=4$ , что свидетельствует о форме частиц близкой к сферической, с размерами, не превышающими 100 нм (десятую долю длины волны рассеянного света).

Исследование дисперсии методом АСМ на приборе НТ-206 «Микротестмашины» (Беларусь) со стандартными кремниевыми зондами «Mikromasch» (Эстония), жесткостью 2,5 Н/м, радиусом кривизны не более 10 нм подтверждает результаты, полученные с использованием метода светорассеяния. Установлено, что частицы на кремниевой подложке образуют сегменты, близкие к сферическим. Среднее значение линейного размера сегмента фосфолипидной структуры по высоте составляет от 30 до 50 нм. Среднее значение линейного размера ширины (диаметр основания сегмента) дисперсных структур составляет 80 нм. Аналогичным образом проведены измерения размера остальных дисперсных частиц.

Установлено, что непосредственно в масле структуры способны осаждаться центрифугированием с возможностью отделения супернатанта (глицеридов и др. компонентов масла).

Таким образом, ультразвуковая обработка нативных растительных масел в присутствии воды приводит к формированию фосфолипидных наноструктур, что может быть положено в основу новых технологий получения фосфолипидных концентратов суспензионного типа, пригодных для применения.

1. Товбин И.М., Фаниев Г.Г. Рафинация жиров. Москва: Пищевая промышленность, 1977.
2. Алексеева С.Л. и др. // Известия вузов. Пищевая технология. № 5-6. 1996. С. 44 – 45.
3. Ван де Хюлст Г. Рассеяние света малыми частицами. Москва: Изд-во иностр. лит., 1961.

## ИЗМЕНЕНИЕ СОБСТВЕННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА И ЦИКЛОДЕКСТРИНА

### ALTERATION IN THE OWN LUMINESCENCE OF SERUM ALBUMIN UNDER THE ACTION OF POLYVINYLPIRROLIDONE AND CYCLODEXTRIN

*И.А. Наговицын<sup>1,2</sup>, И.А. Хайруллина<sup>3</sup>, Борулева Е.А.<sup>4</sup>, Г.К. Чудинова<sup>1,4</sup>*

<sup>1</sup>ФГБУН Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, langmuir@bk.ru, g.chud@list.ru

<sup>2</sup>ФГБУН Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН

<sup>3</sup>Российский университет дружбы народов, Москва, spaldingtm@mail.ru

<sup>4</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, katrinboruleva@gmail.com, g.chud@list.ru

В последнее время уделяется значительное внимание созданию наноструктур на основе биоорганических и биомакромолекул для применения в биологии, медицине, биосенсорике. Наноструктуры, полученные на основе сывороточных альбуминов, активно исследуются как супрамолекулярные системы доставки лекарственных препаратов [1]. Для понимания механизмов физиологического действия многокомпонентных супрамолекулярных систем необходимы подходы, позволяющие регистрировать зависимость свойств от состава и структуры нанообъекта. Одним из таких подходов является регистрация собственной люминесценции белка [2]. Нами изучена триптофановая люминесценция (спектрофлуориметр Shimadzu RF-5300рс) водных растворов сывороточного альбумина человека (САЧ, 0,68 мг/мл, Sigma-Aldrich Co.) в трехкомпонентных системах - с добавлением  $\beta$ -циклодекстрина (ЦД) и поливинилпирролидона (ПВП). Массовое соотношение САЧ и смеси ПВП-ЦД соответствует 1:1. Интенсивность триптофановой люминесценции САЧ ( $\lambda_{ex} = 280$  нм,  $\lambda_{em} = 337$  нм) в однокомпонентных растворах составляла 11,25 отн. ед. При добавлении ЦД, ПВП, и их смесей наблюдали тушение на 3,4 – 6,8 %. Изменения интенсивности люминесценции зависит от соотношения ЦД и ПВП и максимальны при соотношении 4:1 и 1:4 (рис. 1).

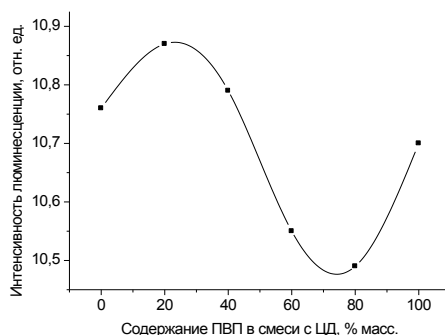


Рис. 1. Изменение собственной люминесценции САЧ в трехкомпонентных растворах САЧ-ПВП-ЦД.