

Vilniaus universitetas
Fizinių ir technologijos mokslų centras
Kauno technologijos universitetas
Vilniaus Gedimino technikos universitetas (VILNIUS TECH)
Lietuvos fizikų draugija

45-oji LIETUVOS NACIONALINĖ FIZIKOS KONFERENCIJA

2023 m. spalio 25-27 d., Vilnius

PROGRAMA IR PRANEŠIMŲ TEZĖS



VILNIAUS
UNIVERSITETO
LEIDYKLA

2023

Bibliografinė informacija pateikiama

Lietuvos integralios bibliotekų informacinės sistemos (LIBIS) portale ibiblioteka.lt.

ISBN 978-609-07-0981-8 (skaitmeninis PDF)

DOI: <https://doi.org/10.15388/LNPC.2023>

Leidinį rengė

LNFK45 organizacinis komitetas

Vilniaus universiteto leidykla, Saulėtekio al. 9, LT-10222 Vilnius

info@leidykla.vu.lt, www.leidykla.vu.lt

Knygos internete knygynas.vu.lt

Mokslo periodikos žurnalai zurnalai.vu.lt

© 2023 LNFK45 Organizacinis komitetas. Published by Vilnius University Press <https://www.vu.lt/leidyba/>

This is an Open Access article distributed under the terms of the <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/> Creative Commons Attribution Licence, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.

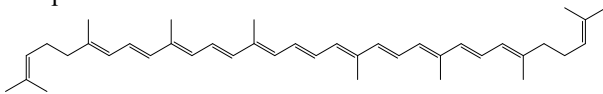
Likopeno su ciklodekstrinu kompleksų Ab initio tyrimas

Lycopene and Cyclodextrins Complexes Ab Initio Study

Goda Bankovskaitė¹, Laurynas Diska¹, Mindaugas Macernis¹

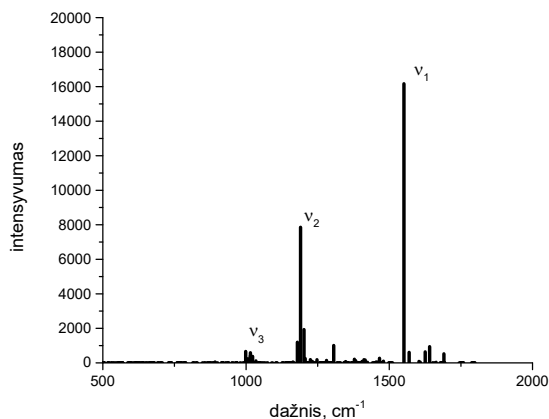
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
goda.bankovskaite@ff.vu.lt

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, ciklodekstrinais [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.

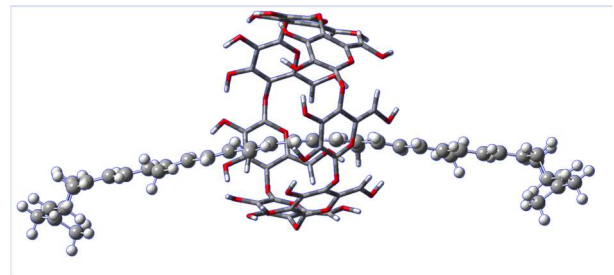


2 pav. Likopeno su ciklodekstrinu Ramano spektras

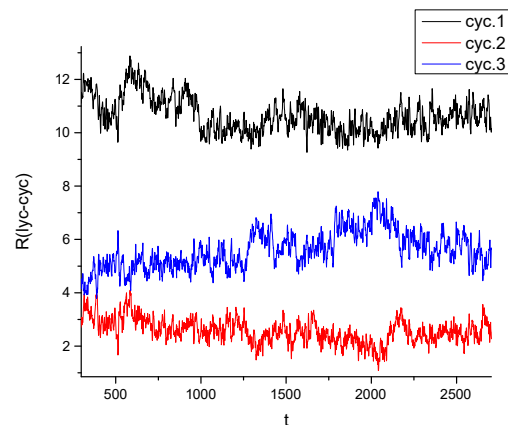
MD simuliacijomis suskaičiuoti kompleksai, kai likopenas yra su 1, 2 ir 3 ciklodekstrinais bei pridėdant vandens molekules ir be jų. Gauta, kad esant mažiau kaip 4 tūkst. vandens molekulių, MD simuliacijos formuoja atskirus vandens klasterius. Ciklodekstrino ir likopeno ryšio energijos ties visomis polieno 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 ciklodekstrinais komplekso 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).