

Likopeno molekulių struktūrų ir spektrų modeliavimas tankio funkcionalų metodais superkompiuteriu

Lycopene structure and spectral properties study using DFT methods with supercomputer

Oskaras Balkus¹, Laurynas Diska¹, Alma Bockuviene², Jolanta Sereikaitė³, Mindaugas Mačernis¹

¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

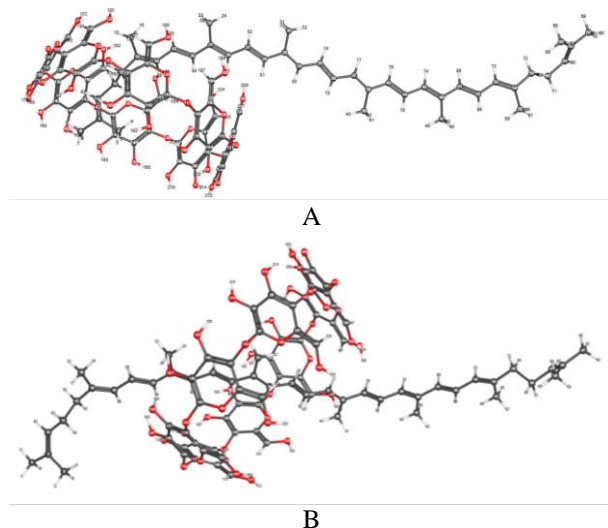
²Vilniaus universitetas, Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius

³Vilniaus Gedimino technikos universitetas, Molekulinės biotechnologijos laboratorija, Saulėtekio al. 11, LT-10223 Vilnius

mindaugas.macernis@ff.vu.lt

Karotinoidai yra labai plačiai gamtoje paplitusios molekulės. Šiuo metu jų gamtoje yra priskaičiuojama daugiau nei virš tūkstančio [1]. Didžiulė karotinoidų gausa ir skirtingos jų cheminės savybės kelia klausimus dėl biologinės jų funkcijos. Neabejojama, kad karotinoidai daro teigiamą įtaką žmogaus sveikatai, tačiau karotinoidai yra netirpūs vandenyje ir tai apsunkina jų potencialų panaudojimą vaistų ar papildų pramonėje. Vienas iš galimų šios problemos sprendimų yra tirpių molekulių kompleksų sudarymas su kitomis molekulėmis [2].

Šiame darbe superkompiuteriu yra modeliuojami karotinoido likopeno ir farmacijos žinomų molekulių – ciklodekstrinų [3] kompleksai, tiriamos šių kompleksų spektrinės savybės. Norėdami atlikti detalią molekulių struktūrų analizę, pasitelkta tankio funkcionalo teorijos (DFT).



1 pav. γ -ciklodekstrino ir likopeno kompleksai gali susiformuoti kelių tipų, pvz. ties karotinoido pradžia (A) ar ties karotinoido viduriu (B).

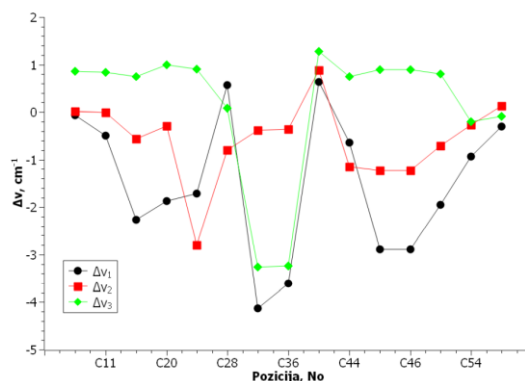
Pirmiausia buvo optimizuojamos tiriamų monomerų α -, β -, γ -ciklodekstrinų ir likopeno geometrijos, pagal šiuo darbe naudotą skaičiavimo metodiką DFT/B3LYP/cc-pVDZ. Vėliau suskaičiuojami jų Ramano spektrai.

Kitu etapu monomerai buvo grupuojami į kompleksus, dirbtinai padedant likopeną ciklodekstrino „viduje“ (1

pav.). Su kiekvienu ciklodekstrinu ir likopenu buvo sudaryta eilė struktūrų ir atrinkta nuo 12 iki 15 stabilių kompleksų tolimesniems tyrimams (1 pav.). Akivaizdu, kad kompleksai gali susiformuoti ties beveik bet kuria likopeno grandinėle vieta. Panašūs rezultatai buvo gauti su betakaroteno struktūra anksčiau [3]. Panašūs rezultatai buvo gauti nagrinėjant kompleksus su α -, β -, γ -ciklodekstrinais.

Visiems ciklodekstrinų kompleksams buvo skaičiuojami Ramano spektrai. Tiriant šių struktūrų spektrus gauta, kad pagrindiniai Ramano spektro pikai ν_1 , ν_2 , ν_3 pasislenka, o šie poslinkiai priklauso nuo ciklodekstrino dydžio ir pozicijos likopeno atžvilgiu. Pagrindinių Ramano spektro dažnių poslinkių skirtumai lyginant su likopeno monomero Ramano spektru yra pavaizduoti 2 paveiksle.

Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Saulėtekis.



2 pav. γ -ciklodekstrino ir likopeno kompleksas Ramano ν_1 linijos poslinkis

Reikšminiai žodžiai: karotinoidai, Ramano spektroskopija, kvantinė chemija.

Literatūra

- [1] Junko Yabuzaki. Carotenoids Database: structures, chemical fingerprints, and distribution among organisms. Database, 2017, 02, 2017
- [2] Phennapha Saokham, Chutimon Muankaew, Phatsawee Jansook, and Thorsteinn Loftsson. Solubility of cyclodextrins and drug/cyclodextrin complexes. Molecules, 23(5), 2018
- [3] M. Mačernis, A. Bockuviene, R. Gruskiene et. al., J. Mol. Str., **1226**, 129362, (2021).