**Молекулярно-динамическое моделирование сахарозы в водных растворах**

***Дещеня В.И.,1,2 Кондратюк Н.Д,.1,2,3* Ланкин А.В., *2,1* Норман Г.Э. *3,2,1***

*Студент, 1 курс магистратуры*

*1Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

*2Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

*3Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия*

*E-mail: deshchenia.vi@phystech.edu*

Углеводы играют ключевую роль во многих биологических процессах и имеют широкое применение в пищевой и фармацевтической промышленностях. Например, сахароза, один из наиболее распространенных дисахаридов, используется в процессах осмотической дегидратации, которые помогают сохранять качество пищевых продуктов, а также выступает в качестве подсластителя и криопротектора.

Несмотря на значительные достижения в изучении сахарозы, остаются еще некоторые вопросы, требующие дальнейшего исследования. Например, не изученными остаются конформационная гибкость молекулы и структурные переходы в водных растворах. Для подробного изучения поведения сахарозы и её взаимодействия с другими молекулами может быть использован метод молекулярной динамики. Данный метод требует подходящего силового поля, аккуратно описывающего взаимодействия между атомами. Однако, широко известна проблема с поиском такого потенциала для углеводов, которую пытаются преодолеть последние несколько лет [1-4].

В данной работе предлагается перспективная модель [4] для описания водных растворов углеводов. Проверяется воспроизводимость ею динамических характеристик водных растворов сахарозы с массовой долей сахара от 10 % до 50 % при температуре от 273 К до 343 К. В работе производится вычисление и анализ уравнения состояния раствора, коэффициентов вязкости и диффузии, а также изучается устойчивость конформаций молекулы сахарозы и их зависимость от массовой доли сахара и температуры. Результаты сравниваются с доступными экспериментальными данными и результатами других МД работ. Исследование показывает, что предсказательная способность предлагаемой модели не уступает существующим моделям, параметризованным специально для водных растворов сахарозы, но при этом может быть использована для моделирования других сахаров.

*Расчёты проведены на суперкомпьютерах "Десмос" и "Фишер" ОИВТ РАН. Исследование выполнено в рамках Программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» (соглашение 075–02-2021–1316 от 30.09.2021).*

**Литература**

1. Jamali S.H., Westen T., Moultos O.A., Vlugt T.J.H. Optimizing Nonbonded Interactions of the OPLS Force Field for Aqueous Solutions of Carbohydrates: How to Capture Both Thermodynamics and Dynamics // J. Chem. Theory Comput. 2018. Vol. 14. No. 12. P. 6690-6700.

2. Lay W.K., Miller M.S., Elcock A.H. Optimizing Solute–Solute Interactions in the GLYCAM06 and CHARMM36 Carbohydrate Force Fields Using Osmotic Pressure Measurements // J. Chem. Theory Comput. 2016. Vol. 12. No. 4. P. 1401-1407.

3. Batista M.L.S., Pérez-Sánchez G., Gomes J.R.B. et al. Evaluation of the GROMOS 56A CARBO Force Field for the Calculation of Structural, Volumetric, and Dynamic Properties of Aqueous Glucose Systems // J. Phys. Chem. B. 2015. Vol. 119. No. 49. P. 15310-15319.

4. Deshchenya V.I., Kondratyuk N.D., Lankin A.V., Norman G.E. Molecular dynamics study of sucrose aqueous solutions: From solution structure to transport coefficients // J. Mol. Liq. 2022. Vol. 367. P. 120456.