

Gluten w symulacji komputerowej

2020

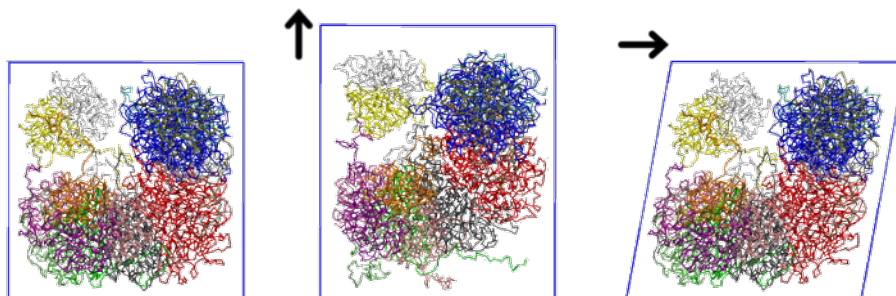
1920

Łukasz Mioduszewski, Marek Cieplak
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk



Gluten można wyizolować z mąki (np. pszennej), wymywając z niej wszystkie inne składniki, rozpuszczalne w wodzie. To co pozostaje składa się z białek, które w ziarnie służą jako magazyn składników budulcowych, a w cieście odpowiadają za jego elastyczność i wzrost podczas pieczenia. Białka glutenu nie mają jednej ściśle ustalonej struktury i mogą tworzyć kompleksy składające się z dziesiątek łańcuchów połączonych wiązaniami kowalencyjnymi i wodorowymi. Elastyczna sieć, powstająca z nich podczas wyrabiania pieczywa odpowiada za lepkosprężyste właściwości ciasta. Może ono powrócić do pierwotnego kształtu po małej deformacji (jak ciało stałe) lub wykazywać lepkość przy nieodwracalnej deformacji (jak ciecz). Aby scharakteryzować taką substancję, używa się zespolonego modułu Younga.

Stworzyliśmy model, w którym każdemu aminokwasowi odpowiada jeden pseudoatom (tzw. model gruboziarnisty), a powiązane ze sobą harmonicznymi pseudo-atomy reprezentują białka glutenu. Oddziałują one ze sobą tak, aby odwzorować wiązania wodorowe i kowalencyjne mostki dwusiarczkowe, które w prawdziwym glutenie są kluczowe dla jego lepkosprężystych właściwości. Podczas symulacji białka znajdują się w pudełku, które podlega zmieniającej się periodycznie w czasie deformacji, a siła potrzebna do ich ścinania, ściskania i rozciągania może być użyta do odtworzenia w symulacji zespolonego modułu Younga. Chociaż nasz model jest bardzo uproszczony (nie ma w nim nawet cząsteczek wody, które reprezentowane są tylko przez szum termiczny), udało się uchwycić w nim najważniejsze cechy glutenu, takie jak różnice między jego różnymi białkami (gliadynami i gluteninami), lepkosprężystość (zespolony moduł Younga) czy odporność na rozrywanie, która rośnie po obróbce mechanicznej (ugniecione ciasto bardziej się ciągnie).



Symulacje pudełka z białkami glutenu (każdy łańcuch w innym kolorze), przy odkształceniu ścinającym (po prawej) i normalnym (w środku)

Literatura:

1. Mioduszewski Ł, Cieplak M (2018) Disordered peptide chains in an α -C-based coarse-grained model. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20:19057-19070

Słowa kluczowe: *gluten, symulacje, model gruboziarnisty, biofizyka*

