

**Термодинамическое моделирование в системах Ti-C-O₂ и Cr-C-O₂
для выбора исходных компонентов при вне вакуумной электронно-лучевой наплавки
слоев карбидов переходных металлов на легированных сталях**

Н. Н. Смирнягина^{1,2}, В. М. Халтанова^{2,3}, С. Ю. Корнилов¹, Н. Г. Ремпе¹, А. Е. Лапина²

¹Томский университет систем управления и радиоэлектроники, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 40

²Институт физического материаловедения СО РАН, 670047, Россия,
г. Улан-Удэ, ул. Сахьяновой, 6, e-mail: smirnyagina09@mail.ru

³Бурятский государственный университет, 670000, Россия, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

Аннотация

Термодинамическими расчетами, выполненными для взаимодействия оксидов титана и хрома с углеродом на поверхности легированной стали 12Х18Н10Т при вне вакуумной электронно-лучевой наплавки, определены адиабатические температуры взаимодействия, и равновесные фазовые составы в интервале температур 300...2673 К. Установлено, что синтезированные фазы представляют собой термодинамически стабильные тугоплавкие соединения – оксиды, карбиды, нитриды (Cr, Ti, Fe), устойчивые в контакте твердофазной металлической основой.

Ключевые слова: Термодинамическое моделирование, композиционные слои карбидов титана и хрома, вне вакуумная электронно-лучевая наплавка, фазовый состав.

**Thermodynamic Modeling in Systems Ti-C-O₂ and Cr-C-O₂ for a Choice
of Initial Components at Non Vacuum Electron Beam Fusing
of Carbides Transitive Metals layers on the Alloyed Steels**

N. N. Smirnyagina^{1,2}, V. M. Khaltanova^{2,3}, S. Yu. Kornilov¹, N. G. Rempe¹, A. E. Lapina²

¹Institute of Physical Materials Science, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Sakhyanova Str., 6,
Ulan-Ude 670047, Russia, e-mail: smirnyagina09@mail.ru

²Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, 40 Lenin Pr., Tomsk, Russia

³Department of Physics and Engineering, Buryat State University, Smolin Str., 24a, Ulan-Ude 670000, Russia,
e-mail: nromanovv@mail.ru

Abstract

Adiabatic temperatures of interaction and equilibrium phase compositions in the 300...2673 K temperature range have been determined by thermodynamic calculations made for the interaction of titan and chrome oxides with carbon on a surface of the alloyed steel 12X18N10T at non vacuum electron beam fusing. Synthesized phases are found to be thermodynamically stable refractory compounds – oxides, carbides, nitrides Cr, Ti, Fe and, stable in contact with the solid-state metallic base.

Key words: thermodynamic modelling, composite layers of the titan and chrome carbides, non vacuum electron beam fusing, phase composition.

Термодинамическое моделирование (ТМ) является универсальным методом исследования, который широко применяется при создании новых металлических, керамических и композиционных материалов и разработке новых эффективных, ресурсо- и энерго-сберегающих методов их синтеза. Например, для расчета бинарных и многокомпонентных диаграмм фазового равновесия, которые являются основой для разработки новых сплавов и составляют одну из важнейших основ материаловедения, используется метод CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams – расчет фазовых диаграмм) [1]. Моделирование равновесного состояния в многокомпонентных многофазных химически реагирующих системах применяется для разработки и оптимизации многих процессов синтеза неорганических веществ в материаловедении, электронной промышленности, нефтехимии и различных областях химической технологии. При этом ТМ проводят в различных режимах, например, изобарно-изотермическом, адиабатическом и др., и используют различные компьютерные методы и специализированные программы. ТМ позволяет определить равновесный состав продуктов взаимодействия (газообразных и конденсированных) в многокомпонентных гетерогенных системах, температуру химически реагирующей системы в адиабатических условиях (т. е. без учета теплопотерь в окружающую среду), оценить влияние различных факторов на выход продукта и создать основу для определения вероятного механизма физико-химического взаимодействия, фазо- и структурообразования в сложных системах при синтезе и эксплуатации новых материалов [2].

Применительно к синтезу новых материалов, ТМ было успешно использовано при разработке и оптимизации процессов получения методом алюминотермии многокомпонентных порошковых насыщающих сред для последующего получения износостойких карбидных покрытий на углеродистых

сталих путем химико-термической обработки (ХТО). Термодинамическое моделирование, применяемое в данном исследовании, является важным этапом при создании композиционных материалов и процессов их получения, основанных на явлении самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) [3].

Целью данной работы являлось рассмотрение взаимодействия между компонентами гетерогенных порошковых композиций на основе оксидов титана и хрома с углеродом на поверхности легированной стали при атмосферном давлении, установление их равновесного фазового состава и прогнозирование термической стабильности карбидов титана и хрома в широком интервале температур, верхнее значение которого соответствует точке плавления металла-основы. Моделирование возможных фазовых и химических превращений при синтезе и электронно-лучевой наплавке продуктов на поверхности стали 12Х18Н10Т при создании композитного слоя карбидов титана и хрома толщиной 100 мкм на воздухе.

Обоснование методики термодинамического моделирования

В СВС-процессах важной характеристикой является адиабатическая температура взаимодействия T_{ad} . В последние годы для ТМ используют компьютерные программы с термодинамическими базами данных (ТБД), которые основаны на поиске минимума энергии Гиббса многофазной многокомпонентной системы. При этом ТМ сводится к поиску в ТБД соединений, которые могут образоваться из элементов, входящих в состав исходных веществ, и определению их количественного соотношения, отвечающего равновесию при заданных условиях. Для СВС-процессов в многокомпонентных системах в Институте структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН (ИСМАН, г. Черноголовка Московской обл.) разработана специализированная программа ИСМАН-ТЕРМО, которая позволяет проводить ТМ только в адиабатическом режиме [4].

Разработанная в МГТУ им. Н. Э. Баумана универсальная программа АСТРА-4 выполняет поиск равновесного состава, отвечающего условию локального максимума энтропии системы S при наличии ограничений (условие сохранения массы каждого элемента и полной внутренней энергии системы) для заданного исходного состава и термодинамического режима. ТБД программы АСТРА-4 основана на справочной литературе по термодинамике индивидуальных веществ и включает большое число неорганических соединений.

Методика применения программы АСТРА-4 для ТМ синтеза материалов в адиабатическом режиме была разработана ранее применительно к классическому СВС и синтезу порошковых сред для ХТО сталей. Она включает проведение серии расчетов с учетом всех возможных бинарных диаграмм состояния и введение в ТБД новых (отсутствующих в стандартной конфигурации) соединений. Состав конечных продуктов, полученных при остывании системы после синтеза от температуры T_{ad} до комнатной, может отличаться от равновесного состава при T_{ad} . Поэтому далее проводится ТМ в изобарно-изотермических условиях при температуре ниже точек фазовых превращений в данной многокомпонентной системе. На каждом этапе расчеты выполняются несколько раз, т. е. итеративно, с учетом температурных областей существования тех или иных фаз-продуктов.

В данной работе для ТМ использована компьютерная программа Тегга (разработка МГТУ им. Н. Э. Баумана), которая представляет собой новую версию программы АСТРА-4. Программа Тегга предназначена для работы в операционной системе Windows и обладает новыми опциями для работы с ТБД, более удобным интерфейсом и расширенными возможностями для выполнения расчетов [5].

Программное обеспечение комплекса Тегга для расчета химических реакций исходит из различных условий равновесия: достижения минимума энергии Гиббса и максимума энтропии. В первом случае, решается оптимизационная задача, представленная в общем, виде условиями $\Delta G^{\circ}_{реакции} \rightarrow \min$;

$$\sum_{i,j}^{N_j} C_{i,j} X_j \leq b_i$$
, где b_i – определенное количество взаимодействующего химического элемента B_i ; X_j – стехиометрический коэффициент j -того соединения, $C_{i,j}$ – количество атомов B_i в соединении j , N – количество химических элементов, участвующих в реакции; n – количество продуктов реакции. Во втором случае, расчет проводится, исходя из условий максимума энтропии $S \rightarrow S_{\max}$, постоянства полной внутренней энергии, выполнения закона сохранения массы всех химических элементов, подчинения газовой фазы уравнению состояния для смеси идеальных газов.

Формулировка задачи термодинамического моделирования требует назначить два условия равновесия изучаемой системы с окружающей средой. Этими условиями могут быть либо численные значения термодинамических характеристик равновесия, либо функциональные соотношения между параметрами этого состояния. В работе варьировали в качестве параметров равновесия системы давление и температуру. Для описания самой системы, как материального объекта, необходимо было знать лишь содержание образующих ее химических элементов. Внутренние и межфазные взаимодействия

описываются модельными термодинамическими соотношениями, для замыкания которых используются свойства только индивидуальных веществ – компонентов равновесия.

Благодаря простоте постановки задачи моделирования программа TERRA позволяет использовать термодинамический метод для изучения большого числа самых разнообразных высокотемпературных состояний и процессов. Среди них можно назвать: а)- определение допустимых условий для проведения технологических процессов нанесения покрытий, б)- синтеза сверхтвёрдых и жаростойких соединений и т.д.

В настоящей работе использовали интерфейсы программного комплекса:

TERRA. Предельное число химических элементов, из которых может состоять исследуемая система, равно 50; число конденсированных фаз, рассматриваемых в ходе одного расчета, ограничено 200, а количество компонентов газовой фазы, образующихся в равновесии (число индивидуальных веществ), может достигать 800. При проведении расчетов для гетерогенных систем возможно использование, как модели однокомпонентных несмешивающихся фаз, так и моделей конденсированных растворов.

TRIANGLE. Расчеты возможны в 2-х режимах:

- для изотермических условий, когда равновесие системы задается значением температуры (T , К) и давления (p , МПа)

- для условий адиабатического равновесного превращения (горения), задаваемого в каждой точке расчета значениями давления (p , МПа) и энтальпии (энтальпии образования исходных веществ (I , кДж/кг).

Rectangle. Выявляются области с одинаковым набором однокомпонентных конденсированных фаз в результате многократных расчетов в заданном температурном диапазоне для всех возможных соотношений исходных веществ.

Расчеты состава фаз и характеристик равновесия проводили с использованием справочной базы данных по свойствам индивидуальных веществ. База данных является составной частью программного комплекса. Основу информации в базе данных составляют термодинамические, теплофизические и термохимические свойства индивидуальных веществ. В базе данных насчитывается более 3000 соединений. В банке данных программы имеются термодинамические сведения различных карбидов, нитридов и оксидов переходных металлов. Образование твердых растворов в конденсированном состоянии не учитывали.

Термическое поведение оксидов, карбидов и исследовали в интервале температур от 273 до 2573 К при атмосферном давлении $p=10^5$ Па. Исследование стехиометрических составов, в которых образуются карбиды переходных металлов, осуществляли в этих же условиях. Исследовали возможные взаимодействия с участием Ti, Cr, Si легированной стали 12X18H10T (Fe70.88Cr0.12Ni10Ti1) в атмосфере инертного газа (He, Ar) и воздуха (N53.91O14.48Ar0.32).

В расчетах учитывали следующие фазы: нитриды TiN, CrN, Cr₂N, Fe₄N и Fe₃N₄, оксиды Cr₂O₃, TiO₂, Ti₂O₃, Ti₄O₇, Ti₃O₅, TiO, FeO, Fe₃O₄, Fe₂O₃, NiO и карбиды TiC, Cr₃C₂, Cr₇C₃, Cr₂₃C₆ и Fe₃C.

Особое внимание уделено исследованию фазовых равновесий и выявлению последовательности фазовых превращений и полей кристаллизации сосуществующих фаз в системе TiO₂-Cr₂O₃-C. Фазовые равновесия во всей концентрационной области через 1-5 мол.%. Были смоделированы изотермические разрезы в интервале температур от 773 до 2573 К и давлении $p=10^5$ Па. Для выявления тенденции кристаллизации той или иной фазы, в концентрационный треугольник наносили изотермы кристаллизационных полей при одном давлении или на изотермическом сечении указывали области фаз с учетом различного давления.

Разрабатываемые материалы предназначены для получения композиционных жаростойких слоев карбидов титана и хрома на поверхности легированных сталей (12X18H10T) при вневакуумной электронно-лучевой наплавке.

Результаты термодинамического моделирования и их обсуждение

В состав исходной шихты вводили вещества, которые при гетерогенном взаимодействии в процессе электронно-лучевой наплавки способны образовывать друг с другом и с основой композиции (Fe-Cr-Ni-Ti) ряд тугоплавких соединений.

Синтез карбида титана TiC. Первоначально смоделировали взаимодействие в системе Ti-C-O₂. В температурном интервале от 1273 до 1673 К наблюдается изменения термодинамических свойств (в три стадии), на основании которых можно оценить величину теплового эффекта химического взаимодействия, составляющую $\Delta H = -486$ кДж/моль.

Взаимодействие оксида титана с углеродом начинается с восстановления, при этом образуются оксиды Ti₄O₇ (1298 К) и Ti₂O₃ (1548 К). В конденсированной фазе наблюдается появление карбида

титана при 1948 К, концентрация которого не меняется до температуры 2173 К, а далее происходит разложение и переход паров титана и углерода в газовую фазу (рис. 1.а). Причем, появление паров титана фиксируется с температуры 1473 К, а начиная с 1228 К, газовая фаза ионизируется (рис. 1.).

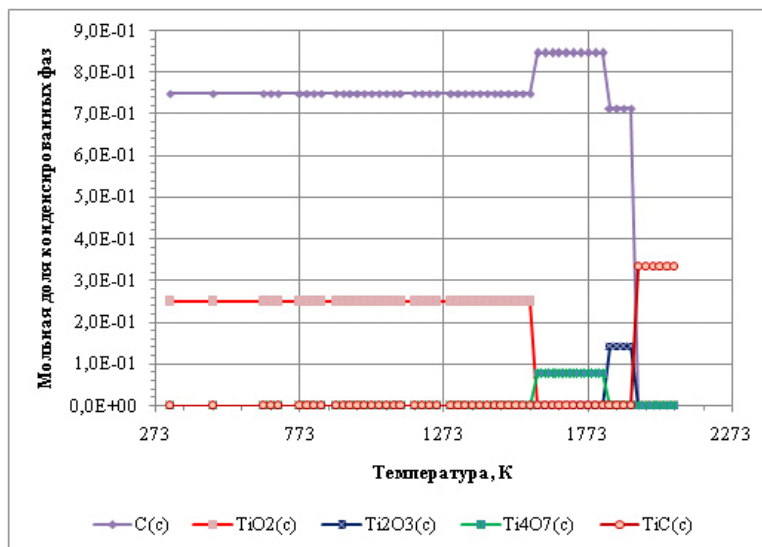


Рис.1. Изменение фазового состава в конденсированной фазе в смеси $\text{TiO}_2\text{-2C}$ при $p=10^5$ Па

Синтез карбида титана TiC на воздухе начинается при температуре 1248 К (рис. 2) со взаимодействия углерода с оксидом титана TiO_2 с образованием Ti_4O_7 , который переходит в оксид Ti_2O_3 (1548 К).

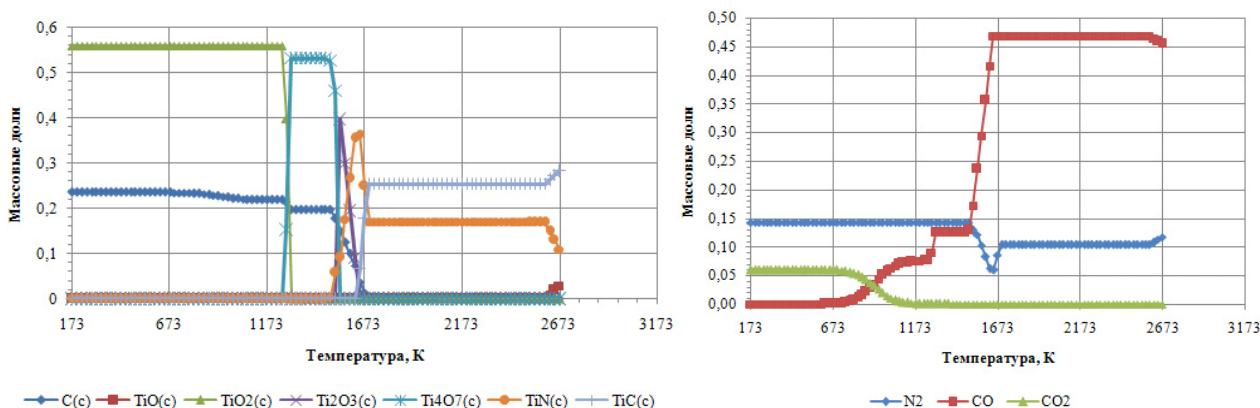


Рис.2. Взаимодействие в составе $\text{TiO}_2\text{:2C}$ на воздухе: а) конденсированные фазы, б) газовая фаза

В стехиометрическом составе $\text{TiO}_2\text{:2C}$ на воздухе может образовываться нитрид титана TiN при температуре 1598 К. Нитрид титана является примесной фазой для карбида титана (рис.2.а). Для получения однофазного карбида необходим избыток углерода. Так, введение избытка в количестве 0,1 (2,1 моля С) приводит к формированию однофазного карбида TiN , причем это сопровождается увеличением некоторого количества карбида. Следует отметить, что при этом наблюдается, незначительное количество примеси углерода по мере повышения температуры. Вероятно, это должно вызывать образование нестехиометрического карбида TiC_{1+x} .

Синтез карбида титана на поверхности стали 12Х18Н10Т на воздухе также происходит многостадийно. Можно выделить стадии взаимодействия исходного оксида TiO_2 с углеродом с образованием Ti_4O_7 (1298 К), Ti_2O_3 (1548 К). Последний оксид взаимодействует с азотом с образованием нитрида титана TiN (1573К) (рис.3).

Образование карбида TiC начинается при температуре 1648 К.

Особо стоит отметить поведение легирующего компонента стали 12Х18Н10Т, а именно, хрома. По термодинамическим расчетам хром в реакционных смесях должен находиться в виде оксида Cr_2O_3 (до температур 1348 К). Далее, оксид взаимодействует с углеродом с образованием карбида Cr_3C_2 , который затем образует карбид Cr_7C_3 (1973 К).

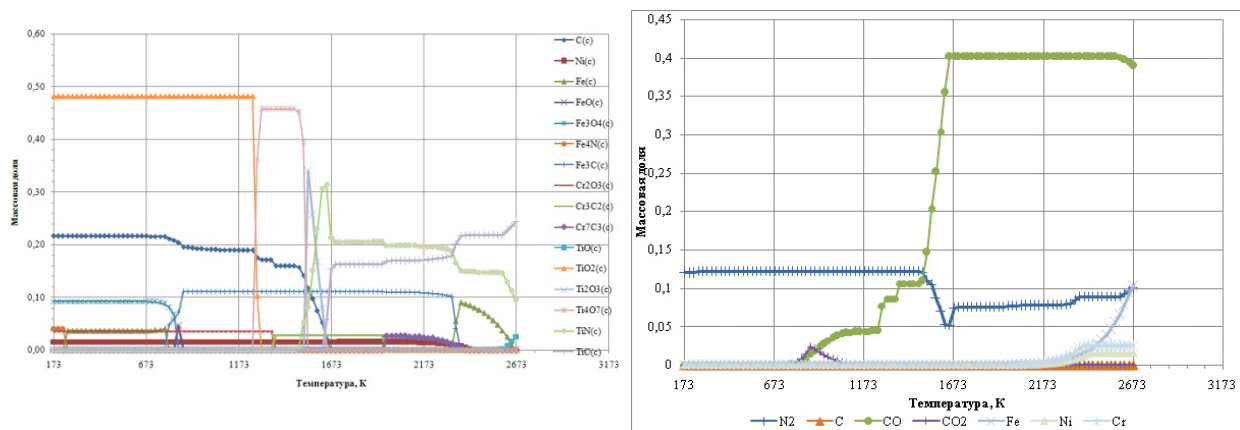


Рис.3. Взаимодействие в составе $\text{TiO}_2\text{:}2\text{C}$ – 12X18H10T на воздухе: а) конденсированная фаза, б) газовая фаза

В результате химического взаимодействия реакционной смеси с поверхностью стали 12X18H10T на воздухе при температурах выше 1673 К в продуктах должны присутствовать нитрид титана TiN , карбиды TiC , Fe_3C и Cr_3C_2 , который затем переходит в карбид Cr_7C_3 .

Введение избыточного количества углерода приводит к уменьшению содержания нитрида титана, а доведение его до 2,2 моля углерода (против 2,1 моля просто на воздухе) вызывает увеличение выхода карбида титана от 30,25 до 33,17 мас.% в смеси карбидов Fe_3C и Cr_3C_2 . Следует отметить, что карбид Cr_3C_2 остается устойчивым и не переходит в карбиды других составов (Cr_7C_3 и C_6Cr_{23}) (рис.3).

Таким образом, представленные термодинамические расчеты показывают на возможность синтеза карбида титана на поверхности легированной стали 12X18H10T на воздухе из реакционной смеси $\text{TiO}_2\text{:}2,2\text{C}$. Карбид TiC должен находиться в смеси с карбидами Fe_3C и Cr_3C_2 .

Синтез композитов на основе карбидов титана и хрома. Поскольку содержание легирующей примеси (хрома) в легированной стали 12X18H10T высоко (18 мас.%), то представляет остановиться на взаимодействии оксидов титана и хрома с углеродом. Была исследована тройная система $\text{TiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3\text{-C}$.

В результате ТМ определены значения T_{ad} и равновесный состав продуктов гетерогенного взаимодействия при этой температуре (рис. 4.а). Адиабатическая температура взаимодействия оксидов титана и хрома с углеродом достигает 3700 К. Фазовый состав в равновесном состоянии сложен (рис.4.б).

Таким образом, упрочняющие фазы должны представлять собой термодинамически стабильные тугоплавкие соединения –карбиды и нитриды хрома, титана и железа. Следовательно, при химическом взаимодействии в данной системе вероятность развития экзотермического взаимодействия в режиме теплового взрыва весьма велика.

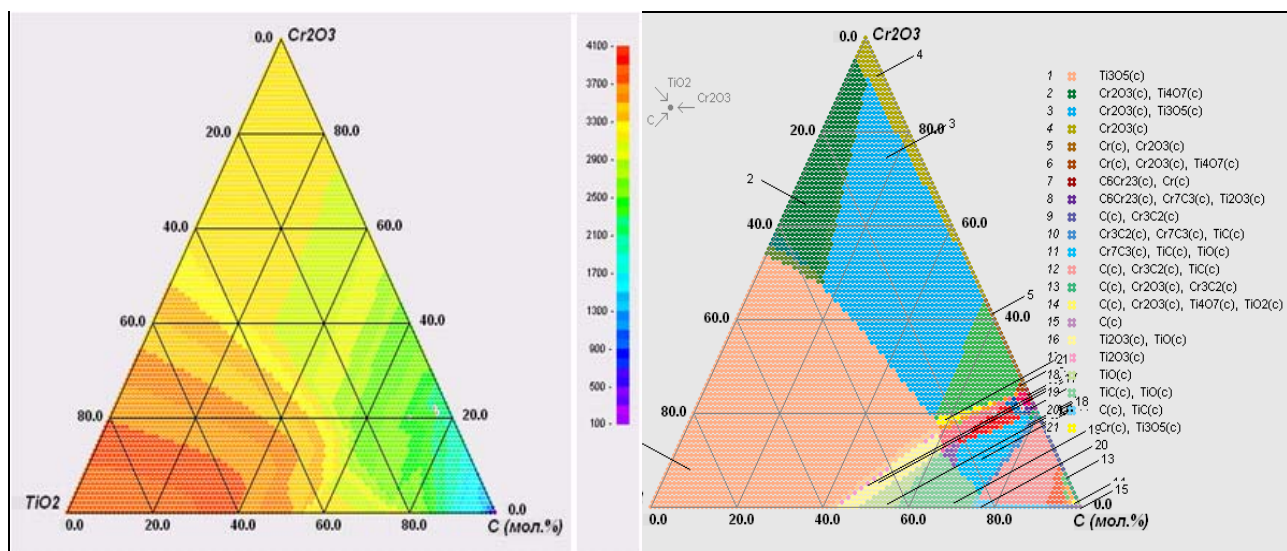


Рис.4.Взаимодействие в системе $\text{TiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3\text{-C}$ ($p=10^5$ Па): а-изотермы; б- равновесный состав конденсированной фазы

В таблице 1 приведены составы, в которых возможно образование карбидов титана и хрома.

Таблица 1

Содержание фаз (мас.%) в конденсированной фазе при 1673 К на воздухе

Состав смеси для композита Structure of a mix for a composite	TiC	Cr ₃ C ₂	TiN	Fe ₃ C	C	Ti ₂ O ₃
TiO ₂ :0.3 Cr ₂ O ₃ :3.3C	33,95	37,21		14,38	7,54	
0.3TiO ₂ : Cr ₂ O ₃ :3.3C		23,08	7,10	8,92		19,82

Для экспериментальной проверки результатов термодинамического анализа стандартными методами рентгенографии и просвечивающей электронной микроскопии проведены исследования фазового состава и структуры композиционных слоев, сформированных при вне вакуумной электронно-лучевой наплавке. Исследования проводили на образцах, размером 80x80 мм и высотой 7 мм, выполненных из легированной стали 12X18H10T. Использовали реакционные обмазки. В состав реакционных обмазок входили стехиометрические смеси оксида TiO₂, оксида Cr₂O₃ и углерода и органическое связующее. В качестве исходных материалов использовали оксид титана, синтезированный со структурой анатаза, оксид хрома квалификации «химически чистый» и березовый уголь марки БАУ. В состав обмазок входили реакционные смеси и органическое связующие в соотношении 1:1 по объему. В качестве органического связующего применяли раствор 1:10 клея БФ-6 в ацетоне. Реакционные обмазки наносили кистью на предварительно обезжиренную поверхность образцов.

По данным металлографического анализа получены слои толщиной 120-150 мкм. Слои равномерны по всей толщине. Наблюдается четкая граница раздела слой-основа.

По данным рентгенофазового анализа (дифрактометр Phaser 2D фирмы Bruker, CuKα –излучение) композиционные слои состоят из кристаллических фаз (72, 9 мас.%(№1) и 74,5 мас.%(№2)) и содержат 27,1 мас.% и 25,5 мас.% рентгеноаморфной фазы, соответственно. Следует отметить, что во всех исследованных образцах на рентгенограммах присутствуют рефлексы, принадлежащие никелю. Содержание никеля колеблется от 1,2 до 2,18 мас.%. Кроме того, можно наблюдать и линии, которые идентифицируются, как мартенсит, но содержание их не превышает 2 мас.%. Появление мартенситных пластин можно наблюдать в аустенитных зернах исходной металлической основы. Появление мартенсита можно связать с закалочными процессами при охлаждении образцов после снятия воздействия электронного пучка. Появление в композитном слое карбидов хрома Cr₇C₃ и Cr₂₃C₆ также свидетельствует о высоких температурах в образцах.

Таблица 2

Фазовый состав слоев на основе TiC и Cr₃C₂ из реакционных обмазок на легированной стали 12X18H10T после вневакуумной электронно-лучевой наплавки

№ образца	TiC 00-003-006-0693	Fe ₃ C 00-003-0400	Austenite 00-023-0298	Fe 01-077-7904	Fe ₃ O ₄ 01-086-1344	Fe ₂ O ₃ 01-088-2359	Cr ₃ C ₂ 00-001-1186	Cr ₇ C ₃ 01-071-3789	Cr ₂₃ C ₆ 00-035-0783
TiO ₂ +0,3Cr ₂ O ₃ +3,3C	13,16	6,33	9,40	4,97	6,11	43,95	3,31	3,85	6,80
2TiO ₂ +2,2C	36,12	13,19	11,34	3,55	2,38	11,57	-	-	-

Кроме того, поскольку синтез карбидов титана и хрома в реакционных обмазках протекает на воздухе, то возможно окисление металлической основы. По данным РФА в образцах фиксируется присутствие оксидов железа Fe₃O₄ и Fe₂O₃.

Таким образом, экспериментальные данные подтверждают эффективность вышеприведенного метода термодинамического моделирования для прогнозирования фазового состава реакционных смесей оксидов титана и хрома и углерода для синтеза и вне вакуумной электронно-лучевой наплавки жаростойких слоев на основе карбидов переходных металлов на легированных сталях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки, в рамках Федеральной Программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014 - 2020 годы», соглашение RFMEFI57714X0018.

Литература

1. Saunders N. CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide / N. Saunders, A. P. Miodownik. – Elsevier Science Ltd., 1998. – 479 p.
2. Белов Г. В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. – М.: Научный мир, 2002. – 184 с.
3. Shiryayev A. Thermodynamics of SHS processes: An advanced approach / A. Shiryayev // International Journal of SHS. – 1995. – № 4. – P. 351–362.
4. Ватолин Н. А. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах / Н. А. Ватолин, Г. К. Моисеев, Б. Г. Трусов. – М.: Металлургия, 1994. – 352 с.
5. Трусов Б. Г. Компьютерное моделирование фазовых и химических равновесий. // "Московский государственный технический университет Н.Э. Баумана". [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://engbul.bmstu.ru/doc/483186>. Инженерный вестник. 77-48211/48318608, август 2012.

Сведения об авторах

Смирнягина Наталья Назаровна, доктор технических наук, главный научный сотрудник Института физического материаловедения СО РАН, smirnyagina09@mail.ru

Халтанова Валентина Михайловна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института физического материаловедения СО РАН, доцент физико-технического факультета Бурятского государственного университета

Корнилов Сергей Юрьевич, кандидат технических наук, доцент Томского государственного университета систем управления и радиотехники, kornilovsy@gmail.com

Ремпе Николай Гербертович, доктор технических наук, профессор Томского государственного университета систем управления и радиотехники

Лапина Анна Евгеньевна, аспирант Института физического материаловедения СО РАН

УДК 579

doi: 10.18.101/978-5-9793-0883-8-264-267

Folding Simulation of α -S2 Casein Phosphopeptide

A. Mijiddorj, O. Enkhdelger and P. Enkhbayar¹

¹ Laboratory of Bioinformatics and Systems Biology, Department of Information and Computer Science, School of Engineering and Applied Sciences, National University of Mongolia, Ulaanbaatar, Mongolia, e-mail: enkhbayar.p@seas.num.edu.mn

Abstract

Different types of casein phosphopeptides are isolated from casein hydrolysis. The most abundant fragment of casein is KNTMEHV(pS)(pS)(pS)EESII(pS)QET, α -S2 casein phosphopeptide, which contains four phosphoserines. This phosphopeptide plays an important role in immune response and in stimulation of bone and teeth mineralization. Casein phosphopeptides are confirmed to enhance the absorption of calcium, zinc and iron, and formulated in milk for infants and functional foods. We examined structural folding and stability of α -S2 casein phosphopeptide in aqueous solution using molecular dynamics simulation.

Key words: casein phosphopeptide, phosphoserine, molecular dynamics simulation, AMBER.

Фолдинг моделирование α -S2 казеина фосфопептидов

Б. Мижиддорж, О. Энхдэлгэр, П. Энхбаяр¹

¹ Лаборатория биоинформатики и системной биологии, Кафедра информатики и вычислительной техники, Школа инженерных и прикладных наук, Монгольский Государственный Университет, Улан-Батор, Монголия, e-mail: enkhbayar.p@seas.num.edu.mn

Аннотация

Различные типы фосфопептидов казеина изолированы от гидролиза казеинов. Самый популярный фрагмент казеина это KNTMEHV(pS)(pS)(pS)EESII(pS)QET, который содержит четыре фосфосерина. Эти пептиды играют важную роль в иммунном ответе и стимуляции костей и минерализации зубов. Казеин фосфопептид применяется для повышения абсорбции кальция, цинка и железа, а также вводится в молоко для младенцев и функциональные продукты питания. Мы исследовали стабильность пептида в водном растворе с использованием моделирования молекулярной динамики. Мы исследовали структурную фолдинг и стабильность α -S2 казеина фосфопептида в водном растворе с использованием моделирования методом молекулярной динамики.

Ключевые слова: казеина фосфопептид, метод молекулярной динамики, AMBER.

Introduction

Casein is one of the most abundant proteins in milk and composes around 80% of milk protein. It is main source of amino acids for young mammals. α -S1-, α -S2-, β - and κ - casein phosphopeptides are isolated from casein by tryptic digestion [1]. There are α S1-casein, β -casein, α -S2-casein and κ - casein at 10-12 mg/ml, 10 mg/ml, 3.7mg/ml, and 3.4 mg/ml, respectively [2].

These phosphopeptides stimulate the proliferation of human peripheral blood lymphocytes [3] and mineralization of bone and teeth [4], enhance of both phagocytosis and immune response [5]. They are involved in calcium, copper, iron and zinc binding [6-8] and dental remineralization [9].