文章编号: 1674 - 7054(2017) 03 - 0335 - 06

刺云实胶对魔芋葡甘聚糖分子链拓扑缠结的分析

王晓珊1 吴先辉23 庞 杰2 袁 毅2 龚静妮2 王 林2

(1. 福建农林大学 材料工程学院, 福州 350002; 2. 福建农林大学 食品科学学院, 福州 350002; 3. 宁德职业技术学院, 福建 福安 355000)

摘 要: 将魔芋葡甘聚糖(KGM)与刺云实胶(TG)以一定的比例复配 通过旋转流变仪测定 KGM - TG 复配体系的相关流变特性,结合分子动力学和拓扑分析学研究 KGM 和 TG 分子的作用方式,探讨刺云实胶对魔芋葡甘聚糖分子链拓扑缠结的作用机理。结果表明,刺云实胶与 KGM 分子间存在协同增效作用,分子链间的主要作用是氢键作用力,刺云实胶的添加使得 KGM 分子链间的拓扑缠结强度与密度的增强,复配体系的力学性能得到加强。从分子作用本质上验证了刺云实胶与 KGM 之间流变性能的理化实验结果。

关键词: 魔芋葡甘聚糖; 刺云实胶; 流变性能; 分子动力学; 拓扑缠结

中图分类号: TS 201.7 文献标志码: A DOI: 10.15886/j. cnki. rdswxb. 2017.03.014

近年来 国内外科研工作者对多糖复配产物的凝胶化过程进行了大量研究 但是 目前的研究主要集 中在外部原因对凝胶宏观的影响,尚未深入到分子机制水平明确揭示其溶胶 - 凝胶机理[1]。目前,用于 探究胶凝机理的方法主要为频谱分析法,但其往往存在无法全面且较为准确地描述出在溶胶 - 凝胶转化 过程中多糖微观结构的变化机理的缺陷[2]。多糖食用凝胶多为亚稳态体系。需要具备一定的热稳定性是 其应用价值的基础 也是当下食用凝胶研究中亟需解决改善的关键科学问题[3-4]。多糖凝胶分子链间的主 要作用是氢键作用力 随着分子链间的拓扑缠结的强度与密度不断加强 缠结点结构紧密 使体系的力学性 能大大加强。魔芋葡甘聚糖(Konjac glucomannan,简称 KGM)是从魔芋块茎中提取而成的天然高分子化合 物 是通过 β – 1 A 型糖苷键将 D – 葡萄糖与 D – 甘露糖连接聚合而成的 在其某些糖残基的 C – 3 位上存在 着通过 β -1 3 型糖苷键构成支链的复杂环状高分子 $^{[5-8]}$ 。单纯用 KGM 制备的热稳定性凝胶产品需要在碱 性条件下实现,且存在易失水、碱味重、高温下不稳定等问题[9] 不能满足食品工业发展的需要 尤其是在 食品热加工领域受到较大限制^[4]。近年来 不少研究者通过将 KGM 与其他多糖在适当条件下复配 利用 交互协同效应,以达到改善凝胶制品性能,拓宽多糖在食品中应用范围的目的[10-12]。刺云实胶(Tara gum 简称 TG) 是一种高分子量多糖 ,主要由半乳甘露聚糖构成,它是由直链 $(1 o 4) - \beta - D -$ 吡喃型甘露 糖单元与 $\alpha-D$ -吡喃型半乳糖单元通过 $(1\rightarrow 6)$ 键聚合而成^[13],具有良好的热稳定性和胶体复配性,但 单一 TG 功能特性单一 加工性能差 限制了其在食品工业的应用[14]。因此 ,如何有效地提高复配体系中 KGM 与其他多糖组分间的配伍性 增强对食品材料的功能调控目前已成为能否成功将其应用于高质量食 用凝胶制备的关键[15]。 KGM 与 TG 复配体系具有优异的配伍性、凝胶性和稳定性[16]。 目前,鲜有有关 KGM 和 TG 分子之间相互作用的研究。而拓扑学作为一门已经渗透在生命领域及其相关领域的学科,为 高分子结构性能关系的研究及新物质的合成提供了有力的帮助[17-19]。通过拓扑分析从分子的结构出发 建立数学模型 ,可预测化学分子的结构和性质 ,从而探究新分子的微观基础 ,用计算机模拟代替部分尝试

收稿日期: 2017-04-20 修回日期: 2017-05-31

基金项目: 国家自然科学基金(31471704);福建省自然科学基金(2017J01155 2014J01384)

作者简介: 王晓珊(1996-) ,女 福建农林大学材料工程学院工科创新班(食品科学与工程方向)2014级本科

生. E-mail: 1051556402@ qq. com

通信作者: 庞杰(1965 –) 男 教授. 研究方向: 食品化学与营养. E-mail: pang3721941@163. com; 吴先辉(1972 –) 男 教授. 研究方向: 多糖的结构与功能. E-mail: 1141091857@qq. com

性的实际操作,工作量大大减少 $^{[18]}$ 。基于此,笔者结合简单的分子动力学模拟和拓扑学分析法,基于 TG与 KGM分子的三维空间结构,采用旋转流变仪研究在宏观尺度上的 TG与 KGM之间重要的分子间相互作用,探讨 TG对 KGM分子链拓扑缠结的影响,以期为新型食品添加剂的功能调控提供可以借鉴的思路和拓扑分析的研究方法。

1 材料与方法

- 1.1 试剂与仪器 魔芋葡甘聚糖(食品级 超通市三艾有机魔芋发展有限公司); 刺云实胶(食品级 郑州博研生物科技有限公司); 其他试剂皆为分析纯及以上; Rheoplus 型 MCR301 流变仪: 奥地利安东帕有限公司; JB200-S 型数字显示转速电动搅拌机: 上海标本模型厂; PL402-C 型电子分析天平: 上海梅特勒 托利多仪器有限公司; HH-2 型数显恒温水浴锅: 江阴市保利科研器械有限公司。
- 1.2 理论方法 拓扑高分子是指一类具有拓扑形态结构的聚合物 即具有支链、环形、多环形以及其杂化结构的一类大分子高分子。与线形高分子相比 拓扑高分子具有很多独特的性质 ,环形拓扑结构是自然界中广泛存在的结构之一 ,如环形的 DNA、环形多肽以及环形的低聚糖和多糖等。按照 P. C. Burns 等拓扑学分析的简化方法[20-21]进行拓扑分析。圆柱螺旋线参数方程为:

$$\begin{cases} x = a\cos\theta \\ y = a\sin\theta \\ z = \pm b\theta = \pm \frac{h}{2\pi} = \pm a\theta \cot \beta \end{cases}$$

式中 $\theta = \omega t$ ω 为角速度 h 为螺距 β 为螺旋角 式中对右螺旋线取正号 ,对左螺旋线取负号。如果以弧长 S 为参数 则其方程为:

$$\begin{cases} x = a\cos\frac{S}{\sqrt{a^2 + b^2}} \\ y = a\sin\frac{S}{\sqrt{a^2 + b^2}} \\ z = \pm\frac{bs}{\sqrt{a^2 + b^2}} \end{cases}$$

KGM 3 级结构每升高的 1 个螺旋,每个单元螺旋由 8 个或 13 个左右的葡萄糖和甘露糖残基连接而成 结构紧密^[22]。基于 P. C. Burns 等拓扑学分析^[23] 运用拓扑结构图把复杂的 KGM 转变成相对简单的平面拓扑结构,有利于对 KGM 结构进行分析和研究,拓扑简化有以下要点:

- (1) 用折点和端点分别代表结构中的碳原子和氧原子;
- (2) 略去 KGM 分子基团中的 O-H 和 C-H 键;
- (3) 用直线表示碳氧和碳碳之间的作用力。

1.3 试验方法

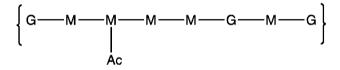
- 1.3.1 KGM TG 溶胶的制备 准确称取一定质量的 KGM 和 TG 粉末(保证总质量为 1.5 g) 将 2 种粉末按一定的比例混合,于室温下搅拌分散于 98.5 g 去离子水中。置于 85 ℃恒温水浴锅中充分混合,用磁力搅拌器以 350 r \min^{-1} 的转速搅拌 30 \min ,形成均匀溶胶,备用。在进行数据的测定前需加热使其处于溶胶状态。按照 TG(KGM) 在体系中的质量百分比 0.3%(1.2%) ρ .6%(0.9%) ρ .9%(0.6%) ρ .1.2%(0.3%) ρ .5%(0) 将溶胶体系依次编号为: 0.3% TG(1.2% KGM) ρ .6% TG(0.9% KGM) ρ .9% TG(0.6% KGM) ρ .1.2% TG(0.3% KGM) ρ .5% TG(0.6% KGM) ρ .6% TG(0.3% KGM) ρ .6% TG(0.4% KGM) ρ .6% TG(0.5% KGM)
- 1.3.2 流变性质测定 采用 MCR301 流变仪 选用流变仪中的 $50~\mathrm{mm}$ 平行板测量系统 , 板间距选择为 $1~\mathrm{mm}$, 再进行如下测定:
- (1) 静态力学分析: 剪切速率范围 $0.01 \sim 100~{\rm s}^{-1}$ 测量温度为(85 ± 1) ℃ 测定不同质量比的 KGM TG 体系黏度及剪切应力随剪切速率的变化。
 - (2) 动态力学分析: 剪切应力范围 0.1~300 Pa 测量温度为(85 ± 1) ℃ 频率为 1 Hz 测定不同质量比

共混体系的储能模量 G与损耗模量 G随剪切应力的变化。每组测定 3 次平行 ,取平均值 相对误差控制在 $\pm 5\%$ 范围内。

1.3.3 分子动力学模拟^[24] 应用分子模拟软件 Material Studio 中的 Visualzer 模块 ,搭建 β – 1 A 糖苷键连接的 KGM 分子基本单元 D – 葡萄糖(G)、D – 甘露糖(M) 以及乙酰基(AC)、 β – 1 A 糖苷键连接的 G – M – AC 支链。在 PCFF 力场估算模拟体系势能 ,在 Discover 模块中选择 Smart Minimize 方法对分子模型进行 5 000 步优化。参数设置中 ,精度等级取 Fine ,选用 COMPASS 力场 ,其中 ,能量收敛公差 0. 42 J • mol^{-1} ,力收敛公差为 2. 1 J • mol^{-1} ,偏转收敛公差为 5×10^{-3} pm ,采用 Atom-based cutoffs 技术进行优化。经分子力学优化后分别得到各个基本单元的能量最低的 3D 结构模型。

2 结果与分析

2.1 TG - KGM 分子链拓扑结构 TG 的半乳糖甘露糖中的半乳糖支链含有较多的羟基 ,其分子结构中半乳糖甘露糖链上没有支链(半乳糖残基) 的区域能够与 KGM 的双螺旋结构以氢键的形式稳固地连接 ,促进空间网络结构的形成。TG 的加入会与 KGM 之间产生一定的协同增效作用 ,使单位空间内的分子链密度增大 ,空间限制使得分子链的无规行走运动受到阻碍 ,因此 ,它只能采取蛇行蠕动 ,即像蛇一样从相邻分子组成的围拢内爬过 ,此时就产生了拓扑缠结 ,这是 1 种拓扑性或纯粹几何性的分子链之间的缠结。所谓拓扑性的 ,是指纯粹研究点、线、面在空间的次序关系而非其确切的物理几何特性 ,KGM 的结构模型如图 1 所示。



G: 葡萄糖残基(C₆H₁₀O₅ ⁻); M: 甘露糖残基(C₆H₁₀O₅ ⁻); Ac: 乙酰基(CH₃O ⁻)

图 1 KGM 结构模型

Fig. 1 Structural model of KGM

KGM 溶于水后 氢键为其体系存在的主要分子作用力 其中形成的氢键类型主要为 KGM 与水分子之间的分子间氢键 ,大多作用于葡萄糖残基和糖苷键的 O 原子上 ,以及甘露糖残基上的 O 原子和乙酰基 (CH_3O^-) 之间通过 H_2O 生成氢键 而 KGM 分子间无氢键的生成。TG 的的半乳糖甘露糖中的半乳糖支链含有较多的 -OH 其水溶液体系可形成大量分子间氢键、分子内氢键。根据 1.2.1 中 P.C. Burns 等拓扑学分析的简化方法 得到 KGM 与 TG 复配体系在水溶液中形成氢键网络结构的模式图(图 2)。由图 2可以看出 ,TG 与 KGM 复配时形成的分子间氢键数明显增加 ,体系内主要形成的是分子间氢键。

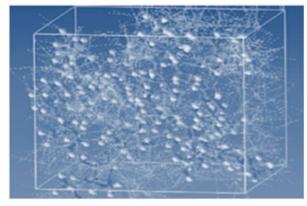


图 2 TG与 KGM 在水溶液中的氢键网络结构

Fig.2 Hydrogen bonding network structure in aqueous solution of TG-KGM

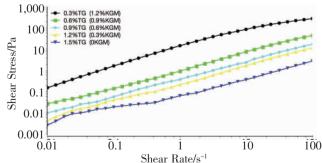


图 3 TG 对 KGM 溶胶中剪切速率与剪切应力的关系 Fig.3 The relationship between the shear rate and shear stress of tara gum in KGM sol

运用介观动态仿真手段探析 TG 和 KGM 分子之间发生相互作用时 H_2O 分子的结构状态。有 2 种状态的 H_2O 分子存在于由 TG 同 KGM 复配而成的凝胶体系中 ,虽然有少量 H_2O 分子是以游离自由水的状态分布于凝胶外表面 ,但还是以与聚合物链发生耦合态缠结的 H_2O 分子为主 ,这部分 H_2O 分子存在于凝胶内部。结果表明 ,TG ,KGM 和 H_2O 分子之间的相互作用包括由大量分子间与分子内氢键形成的强烈氢键作用力,此外还有 TG 与 KGM 一同形成的拓扑网络结构对 H_2O 分子产生的嵌入包埋作用,这可能是 TG 与 KGM 复配体系较稳定的原因。

2.2 TG 对 KGM 溶胶的稳态剪切性质研究 KGM 在溶于水时会形成具有一定黏度的溶胶^[4],TG 对 KGM 的溶胶体系在高剪切速率下应力曲线呈下降趋势,具有假塑性流体的特征。当 KGM 在体系中质量比逐渐增大时,体系的剪切应力增大 2 种组分之间具有增黏作用,这可能是因为 TG 的存在会使 KGM 与其分子链之间发生拓扑缠结,使分子链密度增大,在短距离内形成氢键的可能性较大,但因其键能偏低,当剪切速率升高时,由于聚合物分子链取向随剪切力的方向发生改变,使其在流动方向上从较为散乱的随机排列变得趋于一致,从而使相邻聚合物链之间的相互作用减小,共混溶液表现出剪切稀化效应(图3)。

从图 4 可见 ,TG - KGM 溶胶体系表现出剪切稀化行为 ,可能是在低剪切速率下 , KGM 分子链相互交缠在一起 ,使体系具有一定黏度 ,此时几乎不受剪切力的影响。然而 ,当剪切速率逐步增加时 ,KGM 分子链开始沿着剪切力的方向发生定向重排 .部分缠结点解开 ,流动阻力减小 ,黏度下降。在将 TG 与 KGM 复配后 ,KGM - TG 混合溶胶与单一 TG 溶胶具有相同的假塑性行为 ,这表明复配体系的流变特性主要由 TG 主导。复配体系的表观黏度明显随着 KGM 用量的增加而增加。此外 ,当 KGM 质量比增加时 ,体系表观黏度的上升趋势更为突出。导致此现象可能的原因是 KGM 分子在 TG 分子链形成的空间网状结构中得到了均匀排布 ,使高分子链间的自由运动受到更多的限制 ,交联强度升高 ,分子链间较强的氢键相互作用部分抵消了剪切力对其黏度的影响。这种独特的性质可以赋予液体食物更柔滑的口感 ,提高食品的加工性能 ,为将 TG - KGM 作为 1 种新型食品添加剂提供了可能。

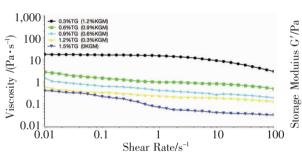


图 4 TG 对 KGM 溶胶中剪切速率与黏度的关系 Fig.4 The relationship between the shear rate and viscosity of tara gum in KGM sol

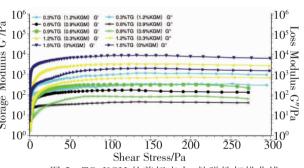


图 5 TG-KGM 的剪切应力-粘弹性扫描曲线 Fig.5 The shear stress-viscoelasticity curve of tara gum in KGM sol

2.3 TG 对 KGM 溶胶的动态力学研究 在探究体系的动态力学性能时,储能模量 G'是用来衡量体系弹性的重要参数,而损耗模量 G''是用来衡量体系黏性的重要参数 $^{[25-28]}$ 。在一定的条件下(图 5),TG 对 KGM 溶胶的 G'和 G''模量的影响变化趋势很接近。G'和 G''在较低的剪切应力下相交,且此时的 G'与 G''相差很小,随着体系内 TG 组分比例的增加,复配体系中 G'和 G'' 2 个模量也随之增加,且 G'始终保持大于 G'' 这表明 TG 的存在有利于 KGM 多糖网络结构的形成,且二者产生了较强的协同增效反应,使二者趋向于形成凝胶。在此过程中 随着分子链间的拓扑缠结的强度与密度不断加强,分子链间发生强烈物理 交换作用 在缠结点结构紧密,形成了网络状的结构,这种缠结结构使体系的力学性能大大加强,从而可以抵抗较大的外力剪切。综合以上数据不难发现,在不同质量比的 TG - KGM 复配体系中 0.9% TG(0.6% KGM) 的综合指标较为优异 粘弹性适中 热稳定性高且胶凝能力强。利用这一性质,可将 TG - KGM 复合凝胶体系应用到食品工业中 如作为果冻、冷饮等的增稠剂、胶凝剂和稳定剂,可在达到更好凝胶效果的同时,获得更致密的组织结构和更高的感官品质与产品质量。

3 结 论

TG 与 KGM 具有协同增效作用,但二者作用的分子机理尚未明确。因此,本研究通过将简单的分子动力学模拟和理化实验相结合,采用旋转流变仪从宏观上探析 KGM 和 TG 的分子间相互作用,得出以下主要研究结论:

- (1) TG 对 KGM 的溶胶呈现剪切变稀的现象,复配体系的流变特性主要由 TG 主导。在低剪切速率下, KGM 分子链相互交缠在一起,使体系具有一定黏度,此时几乎不受剪切力的影响。然而,当剪切速率逐步增加时, KGM 分子链开始沿着剪切力的方向发生定向重排,部分缠结点解开,流动阻力减小,黏度下降。
- (2) TG 有利于 KGM 多糖网络结构的形成,二者具有较强的协同增效效应,氢键作用力是其分子链间的主要作用形式。随着分子链间的拓扑缠结的强度与密度不断加强,缠结点结构紧密,使体系的力学性能大大加强,从分子作用本质上验证了 TG 与 KGM 之间的优异复配性和相容性。
- (3) TG 的添加会使 TG KGM 具有合适的黏度和稳定性高的拓扑网状结构 尤其是 0.9% TG(0.6% KGM) 体系综合指标较为优异 这使其在食品工业中 尤其是在冰淇淋等冷饮食品行业中有极大的发展前景 ,可赋予食品可控膨胀率(粘性表现)、顺滑的产品结构(连续凝冻生产时不断裂)和良好的的咀嚼感(粘弹性结合)具有较高的热稳定性。

参考文献:

- [1] Matsuhisa H, Tsuchiya M, Hasebe Y. Protein and polysaccharide-composite sol-gel silicate film for an interference-free amperometric glucose biosensor [J]. Colloids & Surfaces B Biointerfaces, 2013, 111(6):523-529.
- [2] Kyung-Soo Yi "Hye-Jung Kim. Spectral analysis on a phonon spectral function of a solid-state plasma in a doped semiconductor [J]. Current Applied Physics , 2015 , 15(3): 335 341.
- [3] Pujato N "Díaz G "Barbagelata M S , et al. Preparation and Characterization of a Staphylococcus aureus Capsular Polysaccharide—Protein Conjugate Prepared by a Low Cost Technique: a Proof-of-Concept Study [J]. Applied Biochemistry and Biotechnology , 2015 , 175(1): 141 154.
- [4] 谢丙清,庞杰,谢建华 筹. 蚕丝蛋白对魔芋葡甘聚糖结构与溶胶性能的影响[J]. 现代食品科技,2016(10):125-130.
- [5] Yuan Y, Wang L, Pang J, et al. A review of the development of properties and structures based on konjac glucomannan as functional materials [J]. 结构化学, 2017, 36(2):346-360.
- [6] Yang L, Ma X, Guo N, et al. Konjac glucomannan/Poly(vinyl alcohol) /Na⁺ rectorite nanocomposite films: structure, characteristic and drug delivery behaviour [J]. Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials, 2013, 23(6): 1459-1467.
- [7] Jian W , Wu H , Wu L , et al. Effect of molecular characteristics of konjac glucomannan on gelling and rheological properties of Tilapia myofibrillar protein [J]. Carbohydrate Polymers , 2016 , 150: 21.
- [8] Horinaka J I, Okamoto A, Takigawa T. Rheological characterization of konjac glucomannan in concentrated solutions [J]. Journal of Food Measurement and Characterization, 2016, 10(2): 220 225.
- [9] Chen J, Li J, Li B. Identification of molecular driving forces involved in the gelation of konjac glucomannan: Effect of degree of deacetylation on hydrophobic association [J]. Carbohydrate Polymers, 2011, 86(2): 865-871.
- [10] Xu X , Li B , Kennedy J F , et al. Characterization of konjac glucomannan-gellan gum blend films and their suitability for release of nisin incorporated therein [J]. Carbohydrate Polymers , 2007 , 70(2):192 197.
- [11] Wu C, Peng S, Wen C, et al. Structural characterization and properties of konjac glucomannan/curdlan blend films [J]. Carbohydrate Polymers, 2012, 89(2):497-503.
- [12] Alvarez-Manceñido F, Landin M, Lacik I, et al. Konjac glucomannan and konjac glucomannan/xanthan gum mixtures as excipients for controlled drug delivery systems. Diffusion of small drugs [J]. International Journal of Pharmaceutics, 2008, 349 (1/2):11-18.
- [13] 詹世平,陈淑花,刘华伟 等. 共混对淀粉玻璃化转变特性的影响[J]. 食品研究与开发,2006,27(1):3-5.
- [14] 巴金. 塔拉胶的改性及在改善 CTMP 纸浆性能中的应用 [D]. 济南: 齐鲁工业大学, 2013.
- [15] Du X Z, Li J, Chen J. Effect of degree of deacetylation on physicochemical and gelation properties of konjac glucomannan

- [J]. Food Research International , 2012 , 46(1): 270 278.
- [16] Aymard P , Noble O , Lyothier A. Novel functional food product containing a specific fibre mixture: US , US 20100196532 A1
 [P]. 2013 04 10.
- [17] Chen Z C , Tang J B , Shen Y Q , et al. "Click synthesis" of topological macromolecules [J]. Scientia Sinica ,2011 41(2): 281 303.
- [18] Jian W J, Wang M, Yao M N, et al. Formation sites and microscopic conformation study on the konjac glucomannan molecular helices [J]. 结构化学, 2010, 29(7):1084-1090.
- [19] Nakata P A. Advances in our understanding of calcium oxalate crystal formation and function in plants [J]. Plant Science, 2003, 164(6):901-909.
- [20] Luo X , He P , Lin X. The mechanism of sodium hydroxide solution promoting the gelation of Konjac glucomannan (KGM) [J]. Food Hydrocolloids , 2013 , 30(1):92 -99.
- [21] Oishi K, Maehata Y. Removal properties of dissolved boron by glucomannan gel [J]. Chemosphere, 2013, 91:302-306.
- [22] Pang J, Shen BS, Wu XH, et al. Influences of metal Ions on the network topological structure of konjac glucomannan chain [J]. Journal of Southwest University, 2013, 17(2):697-705.
- [23] Wang Q H, Zheng H, Wu X M, et al. Simulation in vitro on inhibition of calcium oxalate calculus in lithogenic urine by sulfated polysaccharide isolated from laminarin [J]. Journal of Synthetic Crystals, 2006, 35(6):1296-1300.
- [24] 温成荣,傅丽群,谢丙清,等.基于稳定体系的魔芋葡甘聚糖与卡拉胶作用位点的研究[J].食品科学技术学报2014,32(5):21-26.
- [25] Velasco S E , Areizaga J , Irastorza A , et al. Chemical and rheological properties of the beta-glucan produced by *Pediococcus* parvulus 2.6 [J]. J . Agric Food Chem , 2009 , 57(5):1827 1834.
- [26] Rai G J , Kumar A , Biswas P. Effect of excluded volume on the rheology and transport dynamics of randomly hyperbranched polymers [J]. Journal of Chemical Physics , 2015 , 142(17): 174906.
- [27] Vicini S , Castellano M , Mauri M , et al. Gelling process for sodium alginate: New technical approach by using calcium rich micro-spheres [J]. Carbohydrate Polymers , 2015 , 134:767 774.
- [28] Nakauma M, Funami T, Fang Y, et al. Calcium binding and calcium-induced gelation of normal low-methoxyl pectin modified by low molecular-weight polyuronate fraction [J]. Food Hydrocolloids, 2017 69:318 328.

Effect of Tara Gum on the Topological Entanglement of Konjac Glucomannan Molecular Chain

WANG Xiaoshan¹, WU Xianhui^{2,3}, PANG Jie², YUAN Yi², GONG Jingni², WANG Lin²

- (1. College of Material Engineering, Fujian Agriculture and Forestry University, Fuzhou, Fujian 350002, China;
 - 2. College of Food Science, Fujian Agriculture and Forestry University, Fuzhou, Fujian 350002, China;
 - 3. Ningde Vocational and Technical College, Fuan, Fujian 355000, China)

Abstract: Konjac glucomannan (KGM) was blended with tara gum (TG) at a given ratio. The blends were determined in terms of rheological properties by using a rotational rheometer, and the molecular interaction between KGM and TG was analyzed based on molecular dynamics and topological analysis to explore the effect of tara gum on the network topological structure of the KGM molecular chain. The results revealed a synergistic effect in molecules between TG and KGM with hydrogen bonding playing the main role in molecular chain. Adding of TG into KGM resulted in the enhancement of strength and density of the topological entanglement. The mechanical properties of the blends were obviously strengthened, which successfully verified the experimental results of the theological property test between the KGM and TG.

Keywords: Konjac glucomannan; tara gum; rheological property; molecular dynamics; topological entanglement