

23. КВАНТОВО-ХІМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ ВУГЛЕВОДІВ — СТРУКТУРНИХ ОДИНИЦЬ ІНУЛІНУ З АМІНООЦТОВОЮ КИСЛОТОЮ

І.В. Попова, Н.Ю. Зінченко

*Національний університет харчових
технологій*

Ю.В. Слива

*Національний університет біоресурсів
і природокористування України*

Дослідження міжмолекулярних взаємодій, що відбуваються у складних природних системах, часто ускладнюється або відсутністю прямих (селективних) фізичних і фізико-хімічних методів дослідження, або багатокомпонентністю хімічного складу системи, або ж складністю самих об'єктів (речовин) дослідження. Особливо це стосується природних речовин полімерної природи — білків, пептидів, полі- та олігосахаридів. Тому останнім часом для дослідження такого роду об'єктів з успіхом використовуються методи квантовохімічного моделювання, які базуються на рішенні рівняння Шредінгера для молекулярних систем. При цьому враховуються усі можливі взаємодії які можуть відбуватися між ядрами та електронами атомів, які утворили сполуку. В результаті квантово-хімічних розрахунків одержують просторову будову (розміщення один відносно одного атомів) та фізичні характеристики системи (відстані між атомами, кути, енергії зв'язків, ентальпії утворення) в локальному енергетичному мінімумі. Для квантово-механічного моделювання процесів можливої взаємодії вуглеводів, що є складовими частинами інуліну був використаний набір комп'ютерних спеціалізованих програм "HyperChem" версії 7.7. З одержаних результатів видно, що при переході молекули олігосахариду у водний розчин глобулярна структура поступово переходить у спіралеподібну. При цьому чим більш розведений розчин, тим менш стійкою стає глобулярна структура.