

22. ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ГІДРАТАЦІЇ ГЛЮКОЗИ НА ЇЇ КРИСТАЛІЗАЦІЮ МЕТОДАМИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ХІМІЇ

О.В. Грабовська, Н.І. Штангеєва

Національний університет харчових технологій

Зміна розчинності глюкози та в'язкості її розчинів в залежності від температури, а відповідно і режими кристалізації глюкози в ангідридній або гідратній формі досліджені емпіричним шляхом. Для пояснення механізму утворення за тих чи інших технологічних умов кристалів різних кристалографічних систем необхідно з'ясувати механізм взаємодії молекул води з глюкозою, структуру гідратів глюкози та їх стабільність. Розширення знань з енергетики гідrataції глюкози дозволяє науково обґрунтувати технологію кристалізації глюкози в гідратній чи ангідридній формі.

Нами були проведені квантово-хімічні розрахунки електронної будови молекул глюкози у α - та β -таутомерних формах та їх моногідратів методами молекулярної механіки та квантово-хімічними за допомогою програми HyperChem 97. Визначали оптимальні структури моногідратів і відповідні значення стеричної енергії. Оптимізацію молекулярної геометрії та квантово-хімічні розрахунки молекул глюкози у α - та β -формах різних конформацій та моногідратів глюкози проводили напівемпіричним методом AM1 (з точністю градієнта 0,01 ккал/моль⁻¹), що коректно передає геометрію молекули. Нами прораховані енергетичні характеристики більшості можливих конформацій глюкози, щоб виявити найстабільніший за енергією стан.

Наші розрахунки підтверджують, що найбільш енергетично вигідне положення у молекул α - і β -глюкози в конформації C1.

Квантово-хімічними методами були розраховані значення стеричної енергії можливих варіантів моногідратів глюкози і встановлено найбільш стабільні з найменшими значеннями стеричної енергії, що відповідає положенню останньої скоординованої глюкозою молекули води.

Можна вважати, що зміна форми кристалів глюкози при кристалізації з пересичених розчинів залежить від характеру зв'язків молекул глюкози з водою та наявності в розчині домішок.

Метою дослідження було встановлення характеру залежності енергії гідратів α - та β -глюкози від співвідношення кількості молекул води і глюкози.

В якості моделей для розрахунків були обрані молекули α -глюкози та β -глюкози у вакуумі в конформації C1, яка відповідає найбільш стабільному та енергетично виправданому стану молекул, що підтверджено нашими розрахунками. Дані молекули розміщували у „ящику” з періодичними граничними умовами, розміри якого змінювались. Поступово видаляючи молекули води з „ящика”, отримували різні гідрати глюкози, проводили оптимізацію усіх геометричних параметрів моделей і визначали відповідну стеричну енергію.

За даними залежності енергії гідратів глюкози від співвідношення N_w/N_g (N_g – кількість глюкози в розчині, моль) для „ящиків” різних розмірів побудовано графіки, на яких можна виділити три області з різними нахилами кривих залежності стеричної енергії від N_w/N_g .

Існування трьох структурних зон глюкозних розчинів, як наслідок впливу гідrataції, дає можливість пояснити ряд властивостей глюкозних розчинів і пов'язаних з ними технологічних питань, таких як зародження твердої фази та росту і формоутворення кристалів.