

ПРОСТОРОВА І ЕЛЕКТРОННА БУДОВА ЦУКРОЗИ У ВАКУУМІ:
ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ МЕХАНІКИ І КВАНТОВОЇ ХІМІЇ

В.В. Гречка, Л.Д. Бобрівник, І.С. Гулий, Л.С. Дегтярьов, О.М. Мірошников
Український державний університет харчових технологій

Дослідження просторової будови цукрози важлива у зв'язку із вивченням її властивостей і поведінки в технологічних процесах.

На даний час відома просторова будова цукрози у кристалічному стані. За допомогою розрахунків методом молекулярної механіки встановлено три конформера цукрози в розчині. Дані магнітно-резонансної спектроскопії дозволяють отримати важливу, але не пряму інформацію щодо конформацій цукрози і їх динаміки в розчині.

Методом молекулярної механіки за параметризацією MM+ нами досліджено профілі потенціальних енергій можливих конформацій цукрози у вакуумі. Оперуємими геометричними параметрами були торсійні кути Φ і Ψ , визначаючі просторову орієнтацію глюкозного і фруктозного гетероциклів (C-1g-O-1g – кут Φ і O-1g-C-1f – кут Ψ ; позначення g, або f означають належність атома до глюкозної чи фруктозної частини відповідно). Конформаційні стани, які відповіли зменшенню потенціальної енергії, досліджено в напів емпіричному квантово-хімічному наближенні методом РМЗ. Це дозволило отримати більш адекватні дані щодо просторової будови цукрози.

Розраховані дані добре узгоджуються із літературними.

Отримані методом молекулярної механіки результати підтверджуються даними квантово-хімічних розрахунків. Так на проміжку зміни кута Φ від 50° до 150° спостерігається шість великих областей А, В, С, D, E, F (див. рис.). Вони відповідають ряду енергетичних мінімумів, знайдених квантово-хімічним методом. Проміжок від'ємних значень кута Φ має більш рельєфну поверхню: величина потенціальної енергії підвищується в декілька сотень разів. Знайдено шість областей стабільних станів найбільш локалізованих і пов'язаних із поступовим підвищенням значень енергії.

В діапазоні змін кута Φ від 95° до 135° (області А, В, С, D, E, F) даними квантово-хімічних розрахунків підтверджено наявність шести локальних мінімумів. Найбільший локальний мінімум даного діапазону, який одночасно є і глобальним, має значення загальної енергії $E = -4993,2302$ еВ та відповідає комбінації кутів 108° (Φ) і -177° (Ψ). За даними квантово-хімічних розрахунків він знаходиться в області А.



СТВОРЕННЯ НОВИХ МАТЕРІАЛО- ТА ЕНЕРГООЩАДНИХ ТЕХНОЛОГІЙ І ВИСОКОЕФЕКТИВНОГО ОБЛАДНАННЯ ДЛЯ ЦУКРОВОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ

Структура, з параметрами близькими до кристалічного стану, знаходиться в області В. Значення її загальної енергії дещо більше у порівнянні із локальним мінімумом ($E = -4992,9200$ еВ), це пов'язано з утворенням кристалічної ґратки.

Розрахунки методом РМЗ дозволили отримати понад шести десятків можливих конформерів цукрози. Вони відрізняються не тільки величинами кутів Φ і Ψ , а й просторовим положенням гідроксильних груп. Найбільша частина конформерів має кути, які відносяться до областей {А, В, С, D, Е, F}. Отримані дані дозволяють вважати, що конформери знаходяться в динамічній рівновазі. Перехід до інших більш рельєфних областей енергій реалізується, імовірно, по долині Н (рис.)

Таким чином, за допомогою результатів обчислень методами молекулярної механіки і квантової хімії встановлені конформаційні стани цукрози в вакуумі і розглянуті можливі канали переходів між ними.