

## КВАНТОВО-ХІМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФРАГМЕНТА МОЛЕКУЛИ ХІТОЗАНА

*Діль К. В.*<sup>1</sup>, *Оковитий С. І.*<sup>2</sup>

Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара  
м. Дніпро, Україна  
katerina.vlodimirovna@ukr.net

**Вступ.** Одним з представників високоефективних емульгаторів і гелеутворювачів є хітозан. Хітозан здатний утворювати стабільні і текучі гелі порівнюючи з іншими полісахаридами. Перевагою є нешкідливість хітозану, він є екологічно чистим і може тривало застосовуватися в усіх напрямках, в природних умовах цей полісахарид повністю розпадається.

**Матеріали та методи.** Був використаний метод квантово-хімічного комп'ютерного моделювання, з використанням прикладних пакетів програм HyperChem і GaussView.

**Результати та обговорення.** В пакетах прикладних програм Gaussian і GaussView були розроблені моделі ділянок полімерної молекули полісахариду. Виконана геометрична оптимізація досліджуваного фрагмента хітозана (рис. 1).

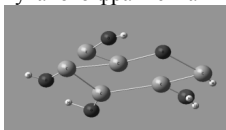


Рис. 1. Фрагмент молекули хітозана

Оптимізацію геометрії здійснюють для пошуку стійких молекулярних структур і перед початком молекулярно-динамічних експериментів. За допомогою напівемпіричних і квантово-хімічних методів розраховано поверхню потенційної енергії фрагмента молекули хітозана, що складається з шістнадцяти фрагментів (рис. 2).



Рис. 2. Розподілення потенційної енергії на поверхності фрагмента молекули хітозана

Поверхня потенційної енергії фрагмента молекули хітозану є потенціалом взаємодії в ізольованій молекулі атомних ядер. В мінімумах на поверхні потенційна енергія має тільки позитивне значення. Результати моделювання дозволили встановити ділянку в молекулярній структурі в області атомів азоту з найбільшою щільністю негативного заряду (рис. 3). Це дозволяє зробити висновок про можливість приєднання протона до атома азоту і обґрунтовує здатність хітозану утворювати колоїдні розчини в органічних кислотах для використання їх при виробництві харчових продуктів. Розчинність хітозану залежить в першу чергу від ступеня дезацетилювання, яке характеризує заряд системи, а також залежить і від умов термообробки і розміру часток. Чим вище температура, тим швидше розчиняється хітозан. Це обумовлено дифузійними процесами, які прискорюють тепловий рух молекул і ступінь гідратації.

### Висновки.

1. Теоретичні дослідження квантово-хімічних характеристик хітозану підтвердили здатність даного полісахариду розчинятися в розчинах і змінювати в бік підвищення активну кислотність суміші.

2. Встановлено корисні властивості хітозану припускають його використання в харчовій промисловості в якості регулятора функціонально-технологічних властивостей готових виробів.