

КВАНТОВОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ТЕРМОДИНАМИКИ ОБРАЗОВАНИЯ АНИОННЫХ ЦЕНТРОВ В МОНОМЕРНОМ ЗВЕНЕ АРАБИНОГАЛАКТАНА – В-D-ГАЛАКТОПИРАНОЗЕ

Ларионова Е.Ю.^а, Медведева С.А.^б

^аФГКОУ ВО «Восточно-Сибирский институт МВД России»,
664074, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 110, e-mail: lari555@mail.ru

^бФБГОУ ВО «Иркутский государственный национальный исследовательский университет»,
664074, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83, e-mail: jrsam@mail.ru

Благодаря своему высокому содержанию в растительном сырье и уникальным свойствам водорастворимый арабиногалактан (АГ) лиственницы занимает особое место среди полисахаридов, поскольку способен выполнять роль матрицы для направленного транспорта различных лекарственных средств и биологически важных микроэлементов¹. Макромолекула АГ лиственницы сибирской имеет высоко разветвлённое строение и состоит главным образом из звеньев галактозы, комплексообразующая способность ОН-групп которой зависит от степени их гидратации, определяющей количеством и пространственным расположением гидроксильных заместителей^{2,3}.

В рамках метода ВЗЛР/6-311++G**//ВЗЛР/6-31+G* и учета эффектов сольватации в водных растворах на уровне РСМ проведена оценка термодинамической устойчивости α - и β -D-галактопираноз и анионов β -D-галактопиранозы. Показано, что в водных растворах по сравнению с газовой фазой термодинамически более устойчивым является мономер β -D-галактопиранозы по сравнению с α -D-галактопиранозой на $\Delta H = 1,61$ ккал/моль ($\Delta G = 1,45$ ккал/моль). В мономерном звене β -D-галактопиранозы при отрыве протона от гидроксильных групп предпочтительным является образование анионных центров при C₁, C₃ и C₄ атомах углерода, понижение свободной энергии Гиббса составляет 12,1, 11,3 и 13,0 ккал/моль, соответственно. Учитывая, что C₁ и C₃ атомы вовлечены в образование галактанового кора АГ, в целом термодинамическая предпочтительность образования анионных центров мономерного звена β -D-галактопиранозы в водных растворах уменьшается в ряду C₄>C₂>C₆ ($\Delta G_4 = -9,5$ ккал/моль; $\Delta G_2 = -3,9$ ккал/моль; $\Delta G_6 = -3,3$ ккал/моль).

Литература

1. Медведева С.А., Александрова Г.П., Дубровина В.И. и др. *Butlerov Commun.*, 2002, 7, С. 45.
2. Антонова Г.Ф., Усов А.И. *Биоорганическая химия*, 1984, 12, С. 1664.
3. Степаненко Б.Н. *Химия и биохимия углеводов*, М: Высш. школа, 1977, 222 с.