

**О.І. Торяник**, д-р хім. наук (*ХДУХТ, Харків*)  
**Д.О. Горяник**, канд. фіз.-мат. наук (*ХДУХТ, Харків*)

**АНАЛІЗ СТРУКТУРИ ВОДЯНИХ РОЗЧИНІВ САХАРОЗИ  
ЗА ДАНИМИ В'ЯЗКОСТІ ТА КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ**

Сахароза є одним з найпоширеніших компонентів багатьох харчових продуктів. Вважаючи, що вода присутня у всіх харчових продуктах, доцільно визначити особливості взаємодії сахарози з водою. Для цього проведено аналіз структури водних розчинів сахарози.

Структура води та водних систем визначається станом сітки водневих зв'язків. Відповідно до моделі сітки неперервних водневих зв'язків у водних системах існують лінійні високо енергетичні та порушені (спотворені) менш енергетичні зв'язки. Збільшення кількості лінійних зв'язків призводить до структурування системи, при цьому середня енергія водневих зв'язків системи збільшується. Зменшення середньої енергії водневих зв'язків свідчить про руйнування водневої сітки та збільшення рухливості молекул води у системі. На рухливість молекул води у системі будуть впливати температура, склад та концентрація компонентів. За даними молекулярної рухливості можна визначити тенденцію до структурування або деструктурування системи.

Для більш об'єктивної оцінки структурних змін у системі треба використовувати енергетичний параметр. Такий параметр можна одержати за аналізом температурних залежностей молекулярної рухливості. У 1889 році Арреніусом було запропоноване емпіричне рівняння для температурної залежності швидкості хімічної реакції, яке в подальшому було з успіхом використано для опису температурної залежності в'язкості рідин

$$\eta = B \exp\left(\frac{E_A}{RT}\right),$$

де  $B$  – множник, який має розмірність в'язкості,  $E_A$  - енергія активації;  $R$  - універсальна газова стала;  $T$  - температура.

Теоретичне обґрунтування енергії активації було дано Я.И.Френкелем як потенціальний бар'єр між двома тимчасовими положеннями рівноваги частинок рідини. Перехід в нове положення рівноваги здійснюється в результаті подолання потенціального бар'єру, який залежить від енергії міжмолекулярних взаємодій.

За даними в'язкості водних розчинів сахарози для різних температур і концентрацій проведено розрахунок енергії активації. Розрахункова формула має вигляд

$$E_A = R \frac{\Delta \ln \eta}{\Delta \frac{1}{T}}.$$

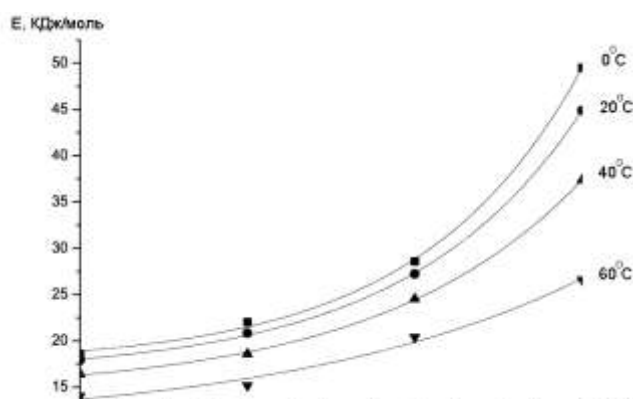


Рисунок – Концентраційна залежність енергії активації в розчинах сахарози при різних температурах

Результати розрахунку наведено на рисунку. Графіки показують, що в інтервалі температур від 0° С до 60° С енергія активації зростає із збільшенням концентрації сахарози. Це свідчить про те, що збільшення концентрації сахарози призводить до структурування системи, тобто сітка водневих зв'язків укріплюється. Структурування більш ефективно виражено при низьких температурах, а при високих температурах суттєво впливає деструктуючий фактор температури. Аналогічні результати одержані також комп'ютерним моделюванням.