

и высокой степени утилизации РВ.

Увеличение вводимых солей до 0,05 % способствовало возрастанию всех показателей до наилучших их значений, а 0,075 % и 0,1 % – к их снижению.

За время роста физиологическое состояние дрожжей оставалось хорошим, они проявляли высокую активность и почкование, при этом накапливали 58,85 % сырого протеина, сбалансированного по аминокислотному составу, не токсичны, отсутствуют нитриты, нитраты, соли тяжелых металлов.

Химический состав последрождевой бражки показал, что добавление морских солей в гидролизат способствует усвоению дрожжами его РВ на 94,45 ... 96,12 %, аминокислот 80 ... 82 %. При этом наиболее полно усваиваются такие аминокислоты как аргинин, пролин и аспарагиновая кислота. Отмечается 100 % усвоение летучих органических кислот.

Результаты промышленной апробации подтвердили принципиальную возможность и экономическую целесообразность переработки нетрадиционных отходов растительного сырья в кормовой белок и применение морских солей в качестве интенсификатора процесса культивирования.

Расчет себестоимости затрат и технико-экономических показателей производства товарных дрожжей показал, что применение морских солей на стадии гидролиза сырья и культивирования значительно сокращает расходы пара и электроэнергии за счет сокращения времени протекания этих процессов, что в конечном итоге снижает себестоимость одной тонны товарных дрожжей. Таким образом, дополнительно на одну тонну товарных дрожжей можно получить прибыли 173 грн., а по заводу производительностью 10 тыс. т дрожжей в год – 1,73 млн. грн.

Проведенные исследования подтвердили, что введение биостимулятора на стадии культивирования дрожжей является не только высокоэффективным способом получения качественной белковой добавки, но и энергосберегающей технологией, позволяющей производителю получать от одного до двух миллионов гривен в год.

Література

1. Килименчук Е.А. Разработка биотехнологии получения кормового белка на основе нетрадиционного сырья: Дис... канд. техн. наук: – 03.00.20. – О., 2003. – 232 с.
2. Величко Т.А. Ферментативная трансформация нетрадиционных растительных отходов в белковые кормовые добавки / Т.А. Величко, Е.А. Килименчук, О.В. Дышкантюк // Наук. пр. ОНАХТ / Міністерство освіти України. – Одеса: 2008. – Вип. 32. – С. 182 – 186.
3. Лопатина Т.Ф. Исследование каталитического действия солей на процессе дегидратации пептоз / Т.Ф. Лопатина, И.И. Корольков. – Сб. реф. мат. // Гидролизное производство. – 1970. – № 7. – С. 3 – 6.
4. Ruzie Nadezda. Влияние ионов Cu на активность дрожжей *Saccharomyces ballii*. Uticaj jona bakra na aktivnost kvasca *Saccharomyces ballii* / Nadezda Ruzie, Dragija Pericin // Jugosloven. vinogr. i vinar. – 1989. – 23. – № 5. – С. 10 – 14.
5. Накопление биомассы, азотистый и аминокислотный состав кормовых дрожжей на средах с биостимуляторами / Н.М. Вербина, Г.И. Фертман, Г.А. Бурлаченко, А.М. Крапиневиц // Пищевая технология, 1976. – № 2. – С. 71 – 74.
6. Перт С. Дж. Основы культивирования микроорганизмов и клеток // Пер. с англ. Т.А. Петрова, И.Н. Позмоговая. – М.: Мир, 1978. – 331 с.

УДК 541.124:547

ПРОГНОЗУВАННЯ УМОВ ДОСЯГНЕННЯ КОНФОРМАЦІЙНОЇ РІВНОВАГИ І ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ СТІЙКОСТІ В СИСТЕМАХ «AlgNa-Ca²⁺»

¹Пивоваров П. П., д.т.н., професор, ²Оковитий С. І., д.х.н., доцент, ¹Пивоваров Є. П., к. т. н., доцент, ²Кондратюк Н. В., ст. викл., ¹Калашнікова К. І.

¹Харківський державний університет харчування та торгівлі
²Дніпропетровський національний університет ім. Олеся Гончара

Методами ММЗ та РМБ досліджено конформаційні властивості димеру манураної кислоти, розраховано величини теплових ефектів реакції утворення м'яких та еластичних гелів на основі натрій мануронату та гулуранату шляхом заміщення йонів натрію на йони кальцію. Охарактеризовані стадії процесу утворення гелів на основі альгіанату натрію.

Conformational properties of dimeric mannuronate acid have been studied using MM3 and PM6 methods, thermal effects of soft and elastic gels formation in substitution reaction of sodium mannuronate and guluronate with calcium ions. Stages of the formation of gels based on sodium alginate were characterized.

Ключові слова: квантово-хімічне моделювання, PM6, MM3, натрію альгінату, процес гелеутворення, гулурунати, манурунати, тепловий ефект реакції гелеутворення.

Розвиток харчової індустрії дозволив створити безліч нових технологій, направлених на задоволення попиту багатьох верств населення різних вікових категорій. На сьогодні багато нових загальноновизнаних брендів у м'ясній, молочній та кондитерській промисловості створені на базі складних математичних та технологічних моделей. Моделювання допомагає на виході одержати безпечний, нешкідливий, економічно вигідний кінцевий продукт та надати йому бажаних властивостей відповідно до бажань споживача. Процеси збагачення класичних продуктів корисними компонентами їжі (вітамінами, мінералами, полісахаридами, що не перетравлюються), зниження калорійності готового продукту, збільшення харчової та фізіологічної цінності за рахунок введення або заміни одних рецептурних компонентів на інші ще й досі могли б залишатись на етапі моделей, оскільки втіленню їх у життя заважають процеси седиментації та синерезису, що проходять у змінених системах. Але на допомогу фахівцям були винайдені такі речовини, що, по-перше, здатні утримувати велику кількість вологи і здешевлювати продукт; по-друге, «зшивати» функціональні групи несумісних компонентів системи між собою і, таким чином, гомогенізувати систему; по-третє, залежно від внесеної кількості виступати у ролі стабілізаторів, загущувачів, геле- та структуроутворювачів, тим самим надаючи харчовим системам різних технологічних властивостей, змінюючи їх консистенцію від текучої рідини до склоподібного тіла, із можливістю існування у стані пасти, еластичного гелю та міцних драглів.

Широке розповсюдження знайшли структуроутворювачі полісахаридної природи, зокрема натрію альгінату, який складається із суміші гулурунати (G) та манурунати (M) залишків, зв'язаних 1→4 глікозидними зв'язками за дієкваторіальним (MM), діаксіальним (GG) та екваторіально-аксіальним (MG та GM) типами зв'язку [1, 2].

Здатність альгінатів до гелеутворення та їх біофункціональні властивості залежать від вмісту α -L-гулурунової кислоти, тому що зв'язування йонів кальцію відбувається у вигляді хелатного комплексу з вісьмома атомами кисню, що містяться тільки у G-блоках. [3] У присутності йонів Ca^{2+} зразки з переважним вмістом G-мономерних ланок звичайно мають форму твердих і пружних гелів, у той час як багаті на M-блоки об'єкти являють собою гелі м'які та еластичні [4].

Як відомо, принцип дії загусника полягає в тому, що при потраплянні у водне середовище полімерна молекула, яка в сухому стані згорнута у клубок, внаслідок дії полярного розчинника розкручується і навколо гідрофільних центрів утворюється гідратна оболонка. При цьому зменшується рухливість молекул і в'язкість розчину поступово збільшується.

Харчові продукти – це квазістабільні багатофакторні системи із складним композиційним складом, властивості яких залежать від порядку та швидкості протікання реакцій внутрішніх процесів із урахуванням стану зовнішніх чинників, що впливають на існування такої системи. Вдосконалення та модернізація технологічних ліній та ділянок неможлива без дослідження тих процесів, на яких побудовано концепцію та стратегію нових технологій, інформація про які, на жаль, залишається недостатньо висвітленою.

При науковому обґрунтуванні технологій структурованих продуктів на основі харчових систем «AlgNa – Ca^{2+} » важливим є теоретичне прогнозування їх термодинамічної стабільності та конформаційної рівноваги, що є обов'язковою передумовою технологічної стабільності продукту.

Тому метою даної роботи є дослідження методами комп'ютерного моделювання конформаційних властивостей димеру манурунової кислоти та визначення термодинамічних параметрів процесів у системі «AlgNa – Ca^{2+} ».

Як було показано поверхня потенційної енергії димеру GG характеризується наявністю трьох мінімумів (1A, 1B, 1C). Згідно з розрахунками, найбільш стабільним виявився конформер із трансашуванням карбоксильних груп (Табл. 1) [3].

Таблиця 1 – Величини торсійних кутів (град.) та теплот утворення (кДж/моль) найбільш стійких конформерів дисахаридів

Конформер	PM6			MM3		
	Φ	ψ	ΔE	φ	ψ	ΔE
Димер GG						
1A	29,32	-55,85	0,00	18,28	-51,06	0,00
1B	27,08	24,35	11,42	43,32	31,25	17,54
1C	7,24	163,21	15,06	15,50	160,49	38,41
Димер MM						
1A	65,00	7,00	6,80	64,86	-5,98	0,00
1B	26,00	-78,00	4,58	30,19	-61,08	7,86
1C	75,00	-154,00	0,00	67,88	-159,50	8,23

Конформаційні переходи характеризуються невеликими значеннями активаційних бар'єрів, що вказує на вірогідність швидкого міжконформаційного переходу під впливом зовнішніх факторів, таких як розчинник, йони металів тощо [3].

Конформаційний аналіз димеру MM свідчить про наявність на поверхні потенційної енергії трьох конформерів (рис. 1).

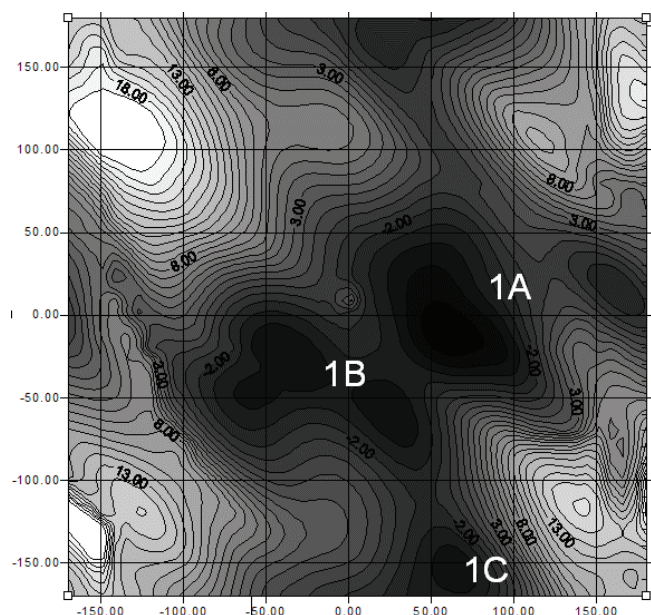
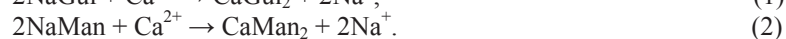
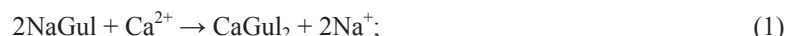


Рис. 1 – Контурна карта поверхні потенційної енергії для молекули димеру MM, розрахована методом MM3

З урахуванням того, що до складу натрію альгінату входять залишки гулуранової та мануранової кислот, з точки зору квантово-хімічного моделювання важливо проаналізувати можливість протікання наступних реакцій:



Квантово-хімічне моделювання наведених систем було проведено методом PM6 [5, 6] з повною оптимізацією геометрії з урахуванням впливу розчинника (води) у макроскопічному приближенні за методикою COSMO. За отриманими результатами було визначено, що тепловий ефект екзотермічної реакції (1) перевищує ΔH реакції (2) і становить -330 кДж/моль. Це свідчить про найбільшу вірогідність протікання реакції 1 з утворенням драглеподібної структури.

Продуктом реакції заміщення за участю гулурунатового залишку став стійкий хелатний комплекс CaGuL_2 , структура якого в трьох проекціях представлена на рис. 2.

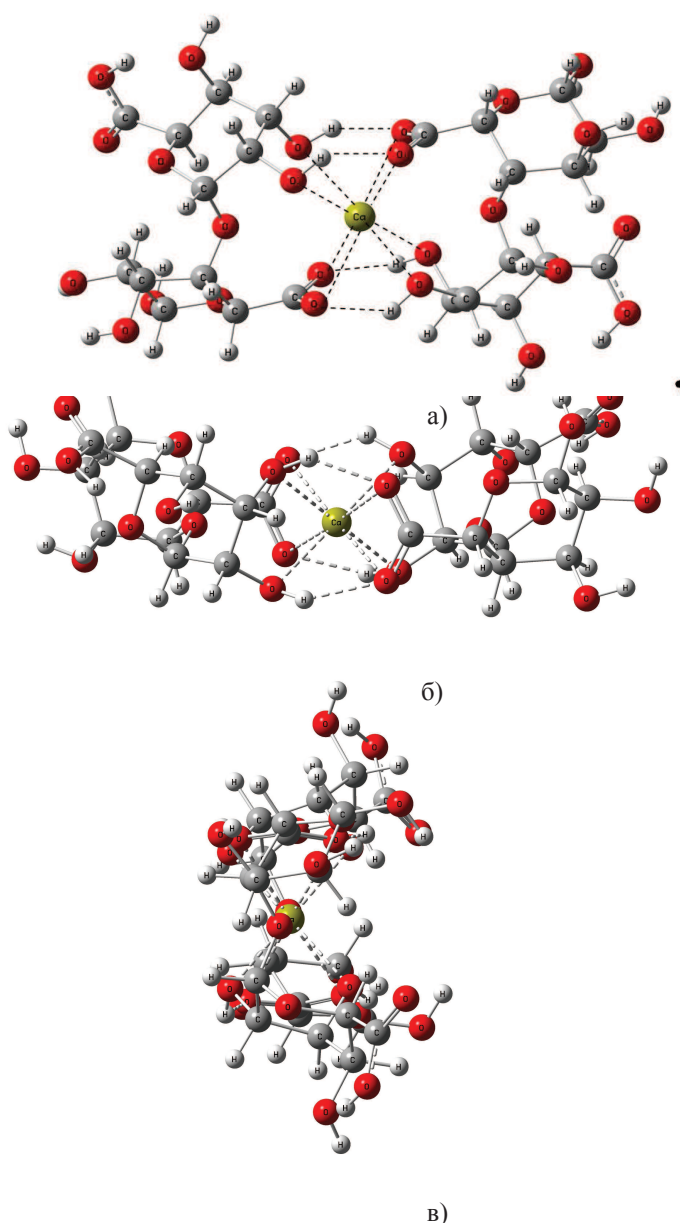


Рис. 2 – Модель стійкого хелатного комплексу кальцій гулурунату: горизонтальна (а) та фронтальні проекції (б, в)

Представлений комплекс складається з транс-димерів GG та являє собою елементарну ланку макро-системи альгінату, особливістю якої є здатність до адитивного росту у просторі як шляхом подовження полісахаридних ланцюгів, так і шляхом добудови наступних шарів.

Висновки

У результаті проведених квантово-хімічних розрахунків встановлено, що полімерні ланцюжки альгінових кислот перебувають переважно в трансoidній конформації. При взаємодії з йонами Ca^{2+} утворюється термодинамічно стійкий хелатний комплекс за участю восьми атомів оксигену. Шляхом квантово-хімічного моделювання методом PM6 були розраховані теплові ефекти реакцій заміщення у системі альгінату, з чого виходить, що вірогідність утворення та існування стабільних манурунатових систем, насичених йонами кальцію, значно менша у порівнянні з розглянутими системами гулурунату.

Література

1. Braccini I. Conformational and configurational features of acidic polysaccharides and their interactions with calcium ions: a molecular modeling investigation / I. Braccini, R.P. Grasso, S. Perez // Carbohydrate Research. – 1999. – Vol. 317, № 13. – P.119–130.
2. Clark A. H. Structure and mechanical properties of biopolymer gels / A. H. Clark, S. B. Ross-Murphy // Advances in Polymer Science. – 1987. – Vol. 83. – P.59–191.
3. Оковитый С. И., Квантово-химическое моделирование димера гулуруновой кислоты / С. И. Оковитый, П. П. Пивоваров, Е. П. Пивоваров, Н. В. Кондратюк, Е. И. Калашникова // Вісник ДНУ. Хімія. – 2010. – С. 34-39.
4. Moe S.T., Draget K.I., Skjåk-Bræk G., Smidsrød O. Alginates. In A. M. Stephen (Ed.), Food polysaccharides and their applications. New York: Marcel Dekker.. – 1995. – P. 245–286. 6. Rees D. A., Welsh E. J. Secondary and tertiary structure of polysaccharides in solutions and gels. Angew. Chem., Int. Ed. Engl. – 1997, 16. – P. 214-224.
5. Stewart J. J. P. MOPAC2009; Stewart Computational Chemistry: Colorado Springs, CO, 2007; <http://OpenMOPAC.net>.
6. Stewart J. J. P. Optimization of parameters for semiempirical methods V: Modification of NDDO approximations and application to 70 elements / J. J. P. Stewart // J. Mol. Model. – 2007. – Vol. 13, № 12. – P. 1173.

УДК 664.8.047.014

ДЕЯКІ ТЕХНОЛОГІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ПОРОШКІВ

Снєжкін Ю.Ф. д-р тех. наук, професор, Петрова Ж.О. канд. техн. наук,
Гетманюк К.М., інженер, Самойленко О.П., інженер
Інститут технічної теплофізики НАН України, м. Київ

У статті наведено характеристику функціональних комбінованих порошків. Зроблено класифікацію рослинних порошків за їх функціональними інгредієнтами. Дано рекомендації щодо використання функціональних порошків. Показано, як залежить відновлюваність порошків у воді від різних комбінацій порошків з овочів та фруктів.

In the article presented the characteristic of functional combined powders. It was made the classification of herbal powders based on their functional ingredients. It is presented the recommendations about using of functional powders. It is shown as depends restoration of powders in water on different combinations of powders from vegetables and fruit.

Ключові слова: антиоксиданти, фолати, пребіотики, фітоекстрогени, функціональні порошки, відновлюваність, осідання.

Дефіцит вітамінів та мінеральних речовин, які є серйозною проблемою для населення країн, що розвиваються, часто зустрічається і в індустріально розвинених країнах.

У даний час для запобігання дефіциту мікронутрієнтів розроблені різноманітні стратегії, основними факторами яких є щоденне або періодичне включення в раціон фармакологічних доз мікронутрієнтів або збагачення ними харчових продуктів масового вживання. Перспективною сферою харчування є виробництво так званих функціональних харчових продуктів, які містять у собі речовини із заданим фізіологічним та оздоровчим ефектом, а також мікронутрієнти, в тому числі вітаміни, антиоксиданти.

Термін «оздоровче харчування» об'єднує такі продукти і домішки, які не лише забезпечують харчовими інгредієнтами, але й мають корисні для організму властивості. Загальноприйнятого визначення оздоровчого харчування нема – є лише декілька термінів, які характеризують це поняття. До таких термінів належать функціональні продукти харчування (Functional Foods) [1,2].

Рослинна сировина особливо цінна за вмістом аскорбінової кислоти, фолатів, каротиноїдів, біофлаваноїдів і є основним та практично єдиним їх постачальником. Ці речовини належать до есенціальної групи та повинні регулярно поступати в організм людини з їжею, незалежно від сезону. Багато таких