

Skirtingo riebalų rūgščių kristališkumo įtaka HOMO ir LUMO lygmenims

Influence of fatty acid crystallinity to HOMO-LUMO levels

Rokas Dobužinskas, Elzė Saldžiūnaitė, Egidijus Kamarauskas, Vygintas Jankauskas, Valentas Gaidelis, Justinas Čeponkus, Kęstutis Arlauskas

Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius
rokas.dobuzinskas@ff.vu.lt

Riebalų rūgštys – rūgštys su kuriomis nuolat susiduriame vartodami maisto produktus, naudojame kosmetikoje ir, galų gale, mes, mūsų ląstelės ir visa gyvoji gamta esame sudaryti iš šių riebalinių-lipidinių membranų, be kurių gyvybė būtų neįmanoma [1].

Fizikiniu požiūriu, kietojo kūno teorijoje vienas įdomiausių reiškinų yra medžiagų gebėjimas sudaryti tvarkias struktūras - kristalus. Šis įdomus reiškinys būdingas įvairių tipų organinėms biomolekulėms: gliukozei, baltymams ir minėtoms riebalų rūgštims. Tokio tipo medžiagos įprastai gali būti skirtingų kristalinių būvių – polimorfinių struktūrų. Skirtingi polimorfai skiriasi skirtingomis fizikinėmis: kietumu, spalva, optinėmis ir elektrinėmis savybėmis.



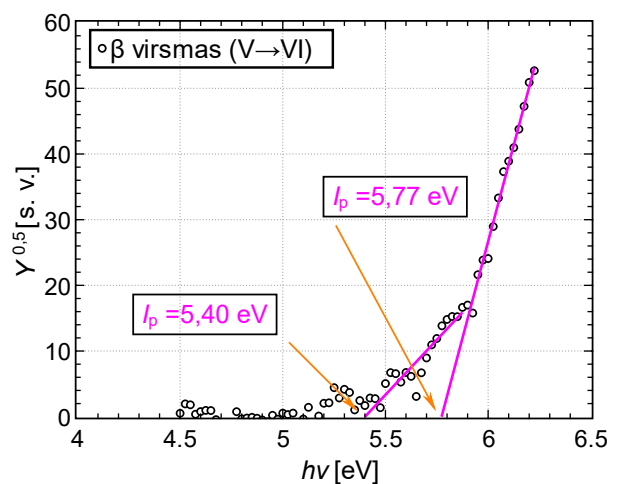
1 pav. Kakavos sviestą (šviesus) supa kakavos pupelės

Kakavos sviestas yra plačiai taikomas maisto pramonėje ir išsiskiria savo struktūrinėmis savybėmis [2]. Įprastai kambario temperatūroje kakavos sviestas yra kietas, tačiau šokolado pramonė reikalauja, jį temperuoti – paruošti stabiliausia forma, kad sviestas būtų kietas kambario temperatūroje bei netirptų salytyje su rankomis. Kakavos sviestą sudaro palmitino, stearino ir oleino rūgštys, tarpusavyje besijungiančios į trigubas molekules – trigliceridus. Kakavmedžio pupelė natūraliai aptinkami trigliceridai pakuodamiesi tarpusavyje gali sudaryti 6 skirtingas fazes ir priklauso polimorfinių medžiagų klasei.

Kietojo kūno elektronikos mokslinė grupė daugelį metų matuoja įvairių naujai susintetintų organinių medžiagų jonizacijos potencialą. Tai labai svarbus medžiagų parametras aprašant jų funkcines ir fundamentines savybes. Su naujausia mūsų sukurta aparatūros modifikacija galima detektuoti pavienius elektronus ir matuoti praktiškai nejautrių šviesai medžiagų jonizacijos potencialą, būtent tokie medžiagų klasei priklauso riebalų rūgštys.

Nors konditerijos pramonėje labai svarbu kiečiausia V-oji kietumo fazė, kitos mažiau stabilios formos taip pat yra įdomios [3]. Žinant kristalinę struktūrą, skirtingoms

polimorfų formoms galima išmatuoti jų optinę sugertį, elektronų jonizacijos potencialą ir įvertinti organinių orbitalių energinę diagramą – HOMO ir LUMO lygmenis (atitinkamai angl. *Highest occupied molecular orbital* ir *Lowest unoccupied molecular orbital*).



2 pav. Šakninė intensyvumo priklausomybė nuo fotonų energijos. Stebima elektronų jonizacija iš skirtingų LUMO lygmenų

Šie tyrimai svarbūs ne tik taikymams, bet ir fundamentaliajai biologijai, biochemijos mokslams ir šokolado entuziastams, kurie nuolat užduota klausimą, iš kur atsiranda ši ypatinga skonio tekstūra, kuria mėgaujasi pasaulio gurmanai.

Reikšminiai žodžiai: riebalų rūgštys, jonizacijos potencialas, HOMO-LUMO.

Literatūra

- [1] A. G. Marangoni S. S. Narine, *Organic Physical Properties of Lipids* (New York, Bese1, 2002).
- [2] R. L. Wille & E. S. Lutten, *J. Am. Oil Chem. Soc.* **43**, 491–496 (1966)
- [3] K. Taguchi, A. Toda, H. Hondoh, S. Ueno, and K. Sato, *Molecules* **26**, 220 (2021)