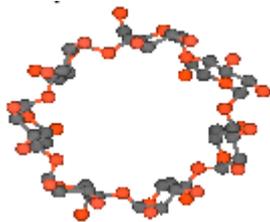


Задача 9. Циклодекстрин

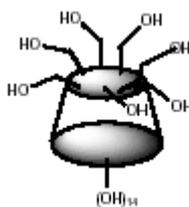
Циклодекстрины – это циклические сахара, которые обычно состоят из 6, 7 и 8 остатков глюкозы: α -, β -, γ -циклодекстрины, соответственно.



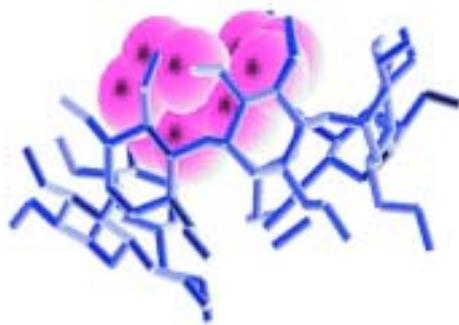
β -циклодекстрин

(атомы кислорода обозначены красным, атомы углерода – черным цветом)

Их форма напоминает усеченный конус с гидрофобной полостью и гидрофильными внешними гидроксильными группами.



Многие гидрофобные молекулы могут проникать в полость, образуя комплексы включения:



Структура комплекса циклодекстрина с феромоном *Dacus Oleae*

Это свойство в сочетании с тем, что циклодекстрины представляют собой природные водорастворимые соединения, делает их удобными веществами для многих приложений; в частности, они могут быть носителями для фармацевтических препаратов.

Комплексы включения с циклодекстринами имеют кристаллическую структуру, которая может быть определена методом рентгеноструктурного

анализа. Рассмотрим кристалл одного из таких комплексов, который описывается эмпирической формулой $C_{42}H_{70}O_{35} \cdot C_{12}H_{12}N_2 \cdot 12H_2O$. Он кристаллизуется в пространственной группе $P2_1$. Элементарная ячейка имеет параметры (с погрешностью): $a = 15.394(7) \text{ \AA}$, $b = 31.995(12) \text{ \AA}$, $c = 15.621(7) \text{ \AA}$, $\beta = 103.738(15)^\circ$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$. В этой элементарной ячейке содержатся 4 молекулы комплекса включения (2 молекулы – в асимметричной ячейке).

9-1. Рассчитайте молекулярный объем (в \AA^3) комплекса включения и плотность кристалла.