Optična rotacija raztopine saharoze

Matija Zanjkovič, Mesarec Tilen, Petauer Maja Junij 2025

Uvod

Pri naši projektni nalogi smo raziskovali optično rotacijo polarizirane svetlobe.

Kaj pa sploh je optična rotacija in zakaj se pojavi?

Dve molekuli, ki sta zrcalni sliki drugi drugi in se ne moreta prekrivati, imenujemo enantiomerni par.

Po tej definiciji voda tako ni enantiomer, ker je smimetrična in se njena slika prekriva z njo.

Molekule slakdkorjev, ko so glukoza, fruktoza in saharoza pa so izomeri, kar pomeni, da imajo enantiomere. Latnost enantiomernih molekul se imenuje kiralnost. Ločeni enantiomeri imajo enake lastnosti v akiralenem okolju

- to pomeni, da imajo enako topnost, fizikalne in spektroskopske lastnosti ter enako kemijsko reaktivnost z akiralnimi reagenti.

Vendar pa imajo v kiralnem okolju različne lastnosti. Enantiomeri reagirajo z različno hitrostjo z kiralnimi reagenti in se različno odzivajo na kiralne katalizatorje. Pogosto povzročajo tudi različne fiziološke učinke, saj so biološki receptorji kiralni. Na primer, vonj R-enantiomera karvona (olja zelene mete) in S-enantiomera (olja kumine) je zelo različen. Fizikalna lastnost kiralnih molekul, ki pa je zanimala nas pa je optična rotacija. Enantiomeri spolarizirano svetlobo rotirajo z isto mero a v nasprotni smeri. Če so ti enantiomeri v enakih koncentracijah, se njihova optična rotacija izniči.

Ker pa molekule glukoze, fruktue in saharoze v naravi nimajo prisotnega enantiomera, pomeni da so optično aktivne in lahko rotirajo polarizirano svetlobo. Prav to smo raziskovali v naši projektni nalogi.

Teorija

Specifično rotacijo α definiramo kot količnik med kotom rotacije α in produktom koncentracije c in dolžine cevi l:

$$[\alpha]_{\lambda}^{\mathrm{T}} = \frac{\alpha}{c \cdot l}$$

Pri tem smo merili v enotah α v stopinjah, c v g/mL in l v dm, torej je enota specifične rotacije

$$[[\alpha]] = \left\lceil \frac{\circ \cdot \mathrm{dm}}{\mathrm{g} \cdot \mathrm{mL}} \right\rceil$$

Naš prvi cilj je bil izmeriti specifično rotacijo saharoze v vodi pri različnih koncentracijah in dveh valovnih dolžinah (rdeča in zelena). Kot drugi cilj pa smo želeli preveriti Drudejev model disperzije, ki opisuje odvisnost specifične rotacije od valovne dolžine svetlobe.

Merjene količine

- Koncentracija saharoze c (g/mL)
- Valovna dolžina λ (nm)
- Kot rotacije α (°)
- Dolžina cevi l (dm)

Dolžina cevi:

$$L = (11.5 \pm 0.5) \text{ dm}$$

 $L = 11.5 (1 \pm 0.043) \text{ dm}$

Volumen raztopine je bil:

$$V = (3000 \pm 60) \text{ mL}$$

$$V = 3000 (1 \pm 0.02) \text{ mL}$$

To smo počeli pri konstantni temperaturi $T=22\pm1\,^{\circ}\mathrm{C},$ saj na specifično rotacijo vpliva tudi temperatura.

Masa saharoze je bila izmerjena z napako 3 g. Relativna napaka koncentracije:

c [g/mL]	σc
0.000	_
0.030	0.033
0.050	0.020
0.070	0.014
0.090	0.011
0.100	0.010

Tabela 1: Relativna napaka koncentracije raztopine saharoze.

Pri meritvah smo opazili, da je pleksi steklo na obeh straneh cevi povzročilo dodatno rotacijo svetlobe. Ta učinek smo upoštevali pri izračunu kotov rotacije.

c [g/mL]	α_r [°]	α_z [°]	$\Delta \alpha$ [°]
0.000	75	79	2
0.030	90	96	2
0.050	102	110	2
0.070	115	126	2
0.090	131	136	2
0.100	137	141	2

Tabela 2: Izmerjeni koti rotacije za rdečo (α_r) in zeleno (α_z) svetlobo.

Meritve z odšteto začetno vrednostjo:

c [g/mL]	α_r [°]	α_z [°]	$\Delta \alpha$ [°]	$\sigma \alpha_r$	$\sigma \alpha_z$
0.000	0	0	4		
0.030	15	17	4	0,26	$0,\!24$
0.050	27	31	4	$0,\!15$	$0,\!13$
0.070	40	47	4	0,10	0,09
0.090	56	57	4	0,07	0,07
0.100	62	64	4	0,06	0,06

Tabela 3: Koti rotacije z odšteto začetno vrednostjo za rdečo (α_r) in zeleno (α_z) svetlobo.

Izračun specifične rotacije

$$[\alpha] = \frac{\alpha}{c \cdot L}$$

Primeri rezultatov (rdeča):

$$[\alpha]_{c=0.030} = 43 \ (1 \pm 0.36)$$

$$[\alpha]_{c=0.050} = 47 \ (1 \pm 0.23)$$

$$[\alpha]_{c=0.070} = 50 \ (1 \pm 0.17)$$

$$[\alpha]_{c=0.090} = 54 \ (1 \pm 0.15)$$

$$[\alpha]_{c=0.100} = 54 \ (1 \pm 0.14)$$

(zelena podobno)

Drudejev model

Prileganje podatkov:

$$[\alpha](\lambda) = \frac{k\lambda^2}{\lambda^2 - A^2}$$

Rezultati:

$$k = 43.9 \pm 11.9$$

$$A = 242 \pm 147$$

Med

S pomočjo znanja o secifični rotaciji glukoze in fruktoze smo se odločili, da bomo primerjali dva meda. In poskušali ugotoviti, ali sta naravna ali z dodatki.

Naravni med je sestavljen predvsem iz glukoze in fruktoze in sicer v razmerju 36 : 41. Specifične rotacije glukoze in fruktoze pri $T=20\,^{\circ}\mathrm{C}$ in $\lambda=589~\mathrm{nm}$ sta:

$$[\alpha]_{glukoza} = 53 \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$
$$[\alpha]_{fruktoza} = -92 \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$

Kar pomeni, da je specifična rotacija medu:

$$[\alpha]_{med} = \frac{36 \cdot [\alpha]_{glukoza} + 41 \cdot [\alpha]_{fruktoza}}{36 + 41} = -24 \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$

Glede na raziskavo (Optical Rotation—A Reliable Parameter for Authentication of Honey?) pa naj bi bila specifična rotacija sintetičnega među bila zaradi dodanih sladkorjev s pozitivno kiralnostjo v rangu: 7-89 $\frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$

Meritve specifične rotacije medu

Meritve smo opravljali pri valovni dolžini $\lambda = 532$ nm in pri temperaturi $T = (22 \pm 1)$ °C. Ker med ni bil popolnoma prosojen, smo meritve opravili pri nižji koncentraciji in sicer $c = 0.005 \cdot (1 \pm 0, 2)$ g/mL.

$$[\alpha]_{med_1} = \frac{\alpha}{c \cdot L} = \frac{-4^{\circ}}{0.005 \cdot 11.5} = -70$$
$$\sigma[\alpha]_{med_1} = 0, 2 + 1 + 0, 04 = 1, 24$$

Rezultat za specifično rotacijo medu:

$$[\alpha]_{med} = (-70 \pm 87) \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$

$$[\alpha]_{med} = -70 \ (1 \pm 1.24) \ \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$

Vidimo, da je specifična rotacija medu precej nižja od pričakovane vrednosti za naravni med, ampak je tudi napaka ogromna. Vendar je naš med bil cvetlični med, ki ima glede na raziskavo specifično rotacijo manjšo kot ostali medi.

Table 1. Minimum (min), maximum (max) and average (avg) specific angle values of honey of different botanical origin, including adulterated (diluted) samples.

$[\alpha]_D^{20}$	Diluted (<i>n</i> = 7) *	Chestnut $(n = 4)$	Coniferous $(n = 3)$	Oak (n = 10)	Thistle $(n = 2)$	Thyme $(n = 1)$
min	+7.2	-11.5	-8.1	-11.3	-18.8	
max	+89.2	+18.4	+9.0	-0.2	+2.5	
avg	+40.2	+0.3	-1.8	-7.5	-8.3	-8.3
$[lpha]_D^{20}$	Coriander (n = 1)	Rapeseed (n = 1)	$ \begin{array}{c} \text{Polyfloral} \\ (n=2) \end{array} $	Acacia (n = 3)	Linden (n = 2)	Mixed (n = 5)
min			-16.9	-19.2	-16.3	-35.2
max			-14.8	-14.1	-15.8	-9.3
avg	-9.4	-11.2	-15.9	-16.0	-16.1	-17.0

^{*} *n* is the number of samples measured for the individual honey types.

Pri drugem medu (iz trgovine) pa smo dobili rezultat:

$$[\alpha]_{med_2} = \frac{\alpha}{c \cdot L} = \frac{3^{\circ}}{0.005 \cdot 11.5} = 52$$
$$\sigma[\alpha]_{med_2} = 0, 2 + 1 + 0, 04 = 1, 24$$

Rezultat za specifično rotacijo drugega medu:

$$[\alpha]_{med_2} = (52 \pm 65) \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$

$$[\alpha]_{med_2} = 52 \ (1 \pm 1.24) \ \frac{\circ \cdot dm}{g \cdot mL}$$

Table 1. Minimum (min), maximum (max) and average (avg) specific angle values of honey of different botanical origin, including adulterated (diluted) samples.

$[\alpha]_D^{20}$	$ \begin{cases} Diluted \\ (n = 7) * \end{cases} $	Chestnut $(n = 4)$	Coniferous $(n = 3)$	Oak (n = 10)	Thistle $(n = 2)$	Thyme $(n = 1)$
min	+7.2	-11.5	-8.1	-11.3	-18.8	
max	+89.2	+18.4	+9.0	-0.2	+2.5	
avg	+40.2	+0.3	-1.8	-7.5	-8.3	-8.3
$[\alpha]_D^{20}$	Coriander (n = 1)	Rapeseed $(n = 1)$	Polyfloral $(n=2)$	Acacia (<i>n</i> = 3)	Linden (<i>n</i> = 2)	Mixed (n = 5)
min			-16.9	-19.2	-16.3	-35.2
max			-14.8	-14.1	-15.8	-9.3
avg	-9.4	-11.2	-15.9	-16.0	-16.1	-17.0

^{*} *n* is the number of samples measured for the individual honey types.

Zaradi gromozanske napake, ki je nastala, zaradi malega kota in velike absolutne napake kota, ne moremo v celoti trditi, da je med umeten. Vendar vseeno sumimo, da je temu tako, saj je med_1 kristaliziral med tem ko med_2 ni.

Zaključek