

Дослідження просторової будови та енергетичних характеристик теоброміну і кофеїну методом молекулярної механіки

*Стеценко Наталія Олександрівна,
к.х.н., доцент кафедри технології оздоровчих продуктів Національного
університету харчових технологій*

Теобромін та кофеїн, які у великих кількостях містяться в чорному шоколаді, підвищують стресостійкість організму, проявляють тонізуючий ефект. Теобромін підвищує кров'яний тиск та прискорює пульс, тобто є природним стимулятором серцево-судинної та нервової систем. Але один грам цього чистого алкалоїда перетворюється на отруту для організму. В готовому шоколаді цієї речовини не більше 0,4%. Така доза безпечна для здоров'я людини, вона помітно підвищує життєвий тонус. Вміст кофеїну в стограмовій плитці шоколаду складає біля 20 міліграмів. Це незначна доза порівняно з тим, що в чашці натуральної кави його в 6 разів більше [3, с. 89].

Чим більше в складі шоколаду какао-продуктів, тим сильніше його збуджуюча дія. Тому гіркий шоколад має найкращу здатність знімати втому та підвищувати працездатність.

На властивості і реакційну здатність біологічно активних речовин, зокрема, представників групи алкалоїдів кофеїну та теоброміну, суттєво впливає їхня просторова будова. Метод молекулярної механіки дає можливість розрахувати геометричні параметри молекул та їхні енергетичні характеристики, які будуть адекватні експериментальним даним [1, с. 151].

Молекулярна механіка є потужним методом вивчення будови і властивостей різноманітних хімічних сполук. Вона ґрунтується на законах пружності, що описують взаємодії, які призводять до поєднання атомів в молекулі. Основні математичні рівняння пов'язані з законом Гука. Це зумовлює необхідність введення ряду параметрів – констант пружності. Тому даний метод можна віднести до емпіричних. Переваги його використання у порівнянні з іншими полягають у відносній простоті та швидкості розрахунків.

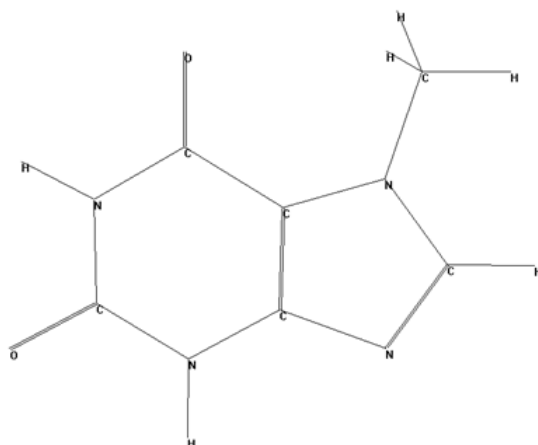
У зв'язку з тим, що в основу молекулярної механіки покладено закони класичної механіки, даний метод дозволяє визначити лише механічну модель молекули. Завдання комп'ютерних програм, що реалізують метод молекулярної механіки, полягає у розрахунку енергетичних характеристик молекули і у знаходженні її найбільш оптимальної геометричної будови шляхом пошуку мінімального значення енергії залежно від координат атомів. Отримана геометрична будова молекули має назву оптимізована.

Одним з програмних комплексів, який дозволяє проводити дослідження просторової будови біологічно активних сполук, їх властивостей, є програма HyperChem. Вона зручна у використанні, має розвинений інтерфейс, дозволяє обмін інформації з іншими програмами [2, с. 54].

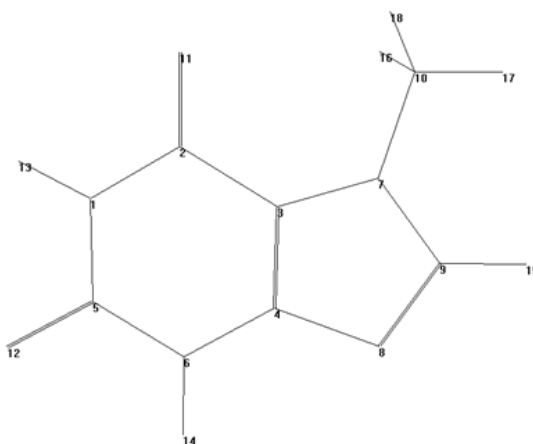
Для характеристики просторової будови молекул теоброміну та кофеїну за допомогою програми HyperChem було визначено оптимізовану геометричну будову молекул. На рис. 1 представлено оптимізовану будову молекули теоброміну із зазначенням нумерації атомів, а на рис. 2 – оптимізовану будову молекули кофеїну. В таблиці 1 порівнюються відстані і кути між окремими атомами, розраховані методом молекулярної механіки у параметризації MM+.

З наведених даних видно, що просторове розташування атомів в молекулах теоброміну і кофеїну свідчить про утворення практично плоских структур. За межі площини, утвореної кільцями, виходять атоми гідрогену, що утворюють метильний радикал. Слід відмітити, що будова молекул обох речовин дуже схожа і відрізняється лише типом радикалу біля першого і шостого атома нітрогену. У випадку теоброміну – це радикали гідрогену, а для кофеїну – радикали метилу. Будова п'ятичленного кільця для обох молекул абсолютно однакова, тому будемо аналізувати просторове розташування атомів в шестичленному кільці молекул.

Рисунок 1. Просторова будова молекули теоброміну: а - з розстановкою символів атомів, б - з розстановкою номерів атомів.

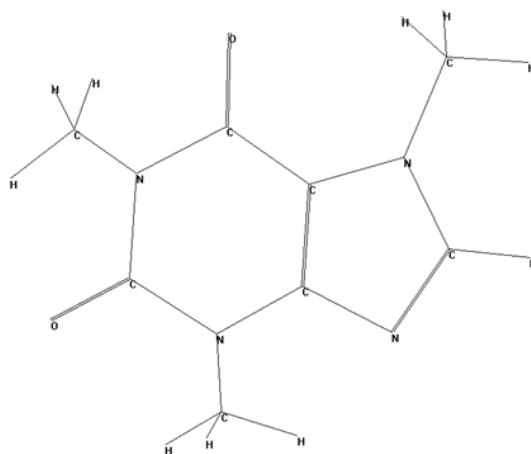


a

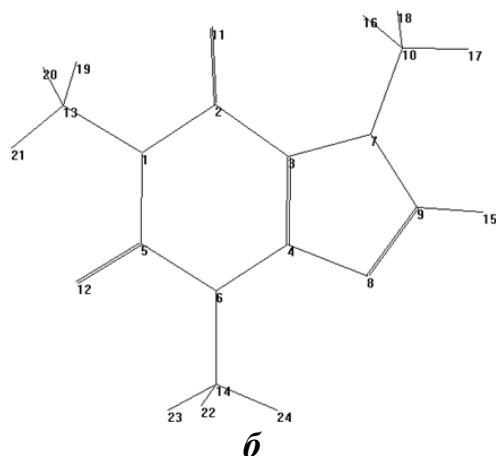


б

Рисунок 2. Просторова будова молекули кофеїну: а - з розстановкою символів атомів, б - з розстановкою номерів атомів.



a



Таблиця 1. Міжатомні відстані, валентні та просторові кути молекул кофеїну і теоброміну

Довжина зв'язку (нм), або кут (градуси)	Теобромін	Кофеїн
1–2	13,8	13,9
2 – 11	12,1	12,1
2 – 3	13,5	13,5
3 – 4	13,4	13,4
4 – 6	13,4	13,6
6 – 14	10,2	10,3
6 – 5	13,8	13,7
5 – 12	12,1	12,1
5 – 1	13,9	13,9
1 – 13	10,2	10,2
13 – 1 – 2	119,72	119
3 – 1 – 5	119,36	120
12 – 5 – 6	122,045	118,89
5 – 6 – 4	120,96	119,9
13 – 1 – 2 – 11	0,0047	0,0059
13 – 1 – 5 – 12	0,0054	0,0067
12 – 5 – 6 – 14	0,002	0,00047
3 – 4 – 6 – 14	180	179,99

З результатів, наведених в таблиці 1, можна зробити висновки про те, що практично всі відстані між атомами, які входять до кілець обох молекул однакові, відмінності в довжинах зв'язків спостерігаються навколо 6 атома нітрогену (N_6). На відміну від цього, значення валентних кутів відрізняються в більшій мірі і також спостерігаються навколо атома N_6 . Значення просторових кутів свідчить про те, що змінюється просторове розташування обох радикалів відносно площини кілець, але більш значні зміни також характерні для радикалу, розташованого біля атома N_6 . Таким чином, поява метильних радикалів в молекулі кофеїну впливає на довжини зв'язків між атомами, розташованими біля атома нітрогену N_6 , до якого приєднується метильна група. Збільшення відстаней між такими атомами свідчить про послаблення міцності хімічного зв'язку, а отже і про більшу реакційну здатність молекули кофеїну порівняно з молекулою теоброміну. Значення валентних і просторових кутів підтверджують той факт, що молекула кофеїну в просторі розташована більш об'ємно, а молекула теоброміну має плоску будову.

В таблиці 2 наведено енергетичні характеристики молекул теоброміну і кофеїну, а саме значення загальної енергії молекул та її складових: енергій зв'язків, кутів, просторових кутів, Ван-дер-Ваальсових взаємодій, напруги зв'язків та електростатичних взаємодій.

Таблиця 2. Енергетичні характеристики молекул кофеїну і теоброміну

Енергетичні характеристики, ккал/моль	Теобромін	Кофеїн
Загальна енергія	4,387	22,95
Енергія зв'язків	0,1	0,61
Енергія кутів	11,194	12,5
Енергія просторових кутів	9,48	7,878
Ван-дер-Ваальсові взаємодії	2,19	20,067
Енергія напруги зв'язків	- 0,063	0,0782
Електростатичні взаємодії	- 18,518	- 18,187

З даних таблиці 2 видно, що молекула теоброміну значно стабільніша за молекулу кофеїну. На це вказує значення загальної енергії, яке в 5 разів

менше від зальної енергії кофеїну. Це підтверджує, що кофеїн проявляє більшу хімічну активність та реакційну здатність, ніж теобромін. Основний внесок у збільшення загальної енергії молекули кофеїну належить взаємодіям Ван-дер-Ваальса, тобто слабким взаємодіям, які мають електричну природу і виникають між електрично нейтральними атомами. Ці взаємодії в основному визначають сили, що відповідають за формування просторової структури біологічних макромолекул. Саме наявність двох додаткових метильних радикалів в молекулі кофеїну майже в 10 разів збільшує Ван-дер-Ваальсові взаємодії.

Висновки. В роботі проведені розрахунки просторової будови молекул теоброміну та кофеїну, які свідчать про утворення практично плоских структур. За межі площини, утвореної кільцями, виходять атоми гідрогену, що входять до складу метильних радикалів в молекулі кофеїну.

Поява метильних радикалів в молекулі кофеїну впливає на довжини зв'язків між атомами, розташованими біля атома нітрогену N₆, до якого приєднується метильна група. Збільшення відстаней між такими атомами свідчить про послаблення міцності хімічного зв'язку, а отже і про більшу реакційну здатність молекули кофеїну порівняно з молекулою теоброміну.

Молекула теоброміну значно стабільніша за молекулу кофеїну. На це вказуює значення загальної енергії, яке в 5 разів менше від зальної енергії кофеїну. Це підтверджує, що кофеїн проявляє більшу хімічну активність та реакційну здатність, ніж теобромін. Основний внесок у збільшення загальної енергії молекули кофеїну належить Ван-дер-Ваальсовим взаємодіям.

Список використаної літератури:

1. Бутырская Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView/ Е.В. Бутырская. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 244 с.
2. Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2005. – 536 с.
3. Шепелев А. Ф. Товароведение и экспертиза кондитерских товаров. Учебное пособие / А. Ф. Шепелев, И. А. Печенежская, А.В. Шлилев. – Ростов-на-Дону: Издательский центр Март, 2001. – 224 с.