

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОФЕИНА В ТЕТРАХЛОРМЕТАНЕ И МЕТАНОЛЕ¹

Гурина Д.Л., Голубев В.А.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново

gdl@isc-ras.ru

Известно, что в больших количествах (200-500 мг/день) кофеин оказывает неблагоприятное влияние на организм, в частности, могут возникать головные боли, тремор, нервозность и раздражительность. Поскольку кофеин содержится в более чем в 60 видах различных растений [1] и более сотни продуктов, таких как кофе, чай, энергетические напитки и пр.[2], возникает потребность в процессе декофеинизации, что, в свою очередь, связано с необходимостью подбора растворителей. В литературе показано, что кофеин обладает малой растворимостью как в неполярном (тетрахлорметане), так и полярном (метаноле) растворителе. Стоит отметить, что сама молекула кофеина, обладая дипольным моментом 3.7 Д, является полярной.

Цель работы состояла в исследовании особенностей проявления межмолекулярных взаимодействий в растворах кофеина в тетрахлорметане и метаноле. Моделирование проводили при температуре 298-313 К и плотности, соответствующей нормальному давлению, в программном пакете Gromacs-5.0.7. Кубическая ячейка с периодическими граничными условиями содержала 5 молекул растворенного вещества и 4096 молекул растворителя. Были рассчитаны функции радиального распределения, средние числа водородной связи (ВС), доли молекул, связанных определенным числом ВС, коэффициенты диффузии, времена жизни ВС.

1. Mumin M., Akther K.F et.al. (2006) *Malaysian J. Chem.*, 8(1):45–51.

2. Rudolph E., Färbinger A., König J. (2012) *Food Additives & Contaminants: Part A*, 29(12); 1849-1860.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-33-00248