

应该积极开展功能因子的构效和量效关系的研究工作,从分子、细胞、器官水平上研究它们的作用机理和可能的毒性作用;其次要用现代技术,从各种天然产物中寻找这类功能因子,然后采用外加法生产第三代功能食品。(6)大力发展有效成分即功能因子的提取、分离、纯化和应用等新技术和新工艺,最大限度地保留功能因子的活性,提高它们在功能食品中的稳定性,加强食品加工新技术的研究和利用。运用现代分离、提取、培植、稳定、评价及制造技术,如膜分离技术、CO₂超临界萃取技术、生物工程和基因工程(酶应用、重组DNA、细胞融合、组织培养等)技术、低温粉碎技术、低温真空技术、微胶囊技术、重组仿生技术、高压灭菌技术、冷冻升华干燥技术及包装和保鲜技术等,逐渐实现从原料中提取有效成分,剔除有害成分,再以有效成分为原料,根据不同人群不同生理(包括病理)条件的不同营养需求,基于营养和生理功能原理,有针对性地设计不同营养功能成分的食品配方,再经大量反复的人体和动物实验证实这些不同配方的食品制成品中确有各自所需的营养保健功效,发挥有益健康的生理调节作用。

除此之外,国家应制定相应的法规或管理办法,加强统一管理,并制定有关标准,建立严格的功能评价和检验审批制度与机构,任何功能食品都应该具有科学的配方、合理的工艺、营养与卫生学评价、生理功能性评价、安全性评价、产品质量标准等基本条件,经过审批方可生产。同时应严格执行广告宣传法,任何产

品标签和广告上的功效作用的宣传均应经过审批,不得随意宣传,误导消费者。还应大力加强日常的监督检查、抽查工作,并应有分明的奖惩制度。功能食品的生产企业要有严肃的质量责任心,生产必须实现程序化、标准化、规范化,对原料、科研、生产、加工、包装、运输、仓储、销售等一系列环节实行全面质量管理,以确保各个环节严格管理,无一疏漏。加强对国民营养知识的宣传与指导,使大家对营养与健康、营养功能因子与机理有所了解,能够正确地指导自己和家人的购买和饮食行为。

总之,我国人民经济水平在不断提高,保健意识逐渐增强,功能食品的市场潜力不可估量,只要各有关方面携起手来,把握良机,生产出更多卫生安全、优质高效、高档次的功能食品,必将对促进我国人民健康水平的提高乃至全人类健康的改善作出巨大的贡献。

参考文献

- 1 汪文陆等. 功能性食品的最新进展与开发. 食品工业科技. 1996 (2) 84~86.
- 2 方守仁等. 国内外功能食品的发展现状和趋势. 中国食品工业. 1996 (6).
- 3 王薇. 营养保健食品的发展与管理. 食品科技. 1995 (2).
- 4 郑健儿. 功能性食品. 中国轻工业出版社.
- 5 揭广川, 贡汉坤. 食品工业新技术及应用. 中国轻工业出版社.
- 6 中国食品科学技术学会、轻工业部食品工业司编. 功能食品的发展. 21世纪中国食品. 《食品与机械》, 92增刊, 124~127.

氨基酸结构特征与甜味关系研究

梁兰兰 宁正祥 华南理工大学食品工程系 510641

摘 要 采用全略微分重叠法(CNDO法)对13种呈味氨基酸的量子化学参数进行了计算,并对氨基酸分子结构特征与甜味间的关系进行了相关分析。结果表明:氨基酸 α -H、羰基-O以及氨基上的一个氢

原子与甜度极显著相关 ($P < 0.01$)。氨基酸可能以氢供给基 (α -H) 和氢接受基 (羰基-O), 与甜味受体上的氢接受基 (B)、氢供给基 (AH) 结合形成氢键; 氨基上的一个氢原子与甜味受体上第 3 点结合形成氢键, 其强度决定甜味的强弱。

关键词 氨基酸 量子化学参数 甜味

Abstract 13 kinds of amino acid were calculated by CNDO method (Complete Neglect of Differential Overlap method), and relationship analysis was done between molecular structure of amino acid and sweet taste. It was found that sweet taste was significantly related to α -H, carbonyl of amino acid and one of amino-H ($P < 0.01$). It was supposed that the sweet taste response was intermolecular hydrogen bonding between amino acid and taste bud receptor site. The sweet unit of amino acid was α -H, carbonyl-O and one hydrogen atom of NH_3^+ group. The taste bud receptor site was AH (hydrogen provider) and B (hydrogen acceptor). The strength of the hydrogen bond between H of NH_3^+ group and the 3rd receptor site of taste bud resolved in the intensity of sweetness.

Key words Amino acid Quantum chemical conference Sweet taste

食品的基本味分为“酸、甜、苦、咸”4种。这4种味感和化学结构的关系, 自古就引起化学工作者的兴趣。至今已测定了大量天然存在的甜味物质、苦味物质等的化学结构, 并人工合成了很多这类化合物, 也阐述了味感和化学结构的关系, 其中尤其对甜味物质研究得最详细。

有关甜味和化学结构关系的理论很多, 其中以 Shellenberger、Kier 等人的学说最为合理。Shellenberger 认为甜味物质都有氢供给基 (AH) 和氢接受基 (B), 它们与甜味受体上也有的这两个基团形成氢键。甜味强弱与这种氢键的强度有关^[1,2]。Kier 认为甜味物质中有疏水基存在时, 其甜味会大大增强^[3]。根据他们的理论, 人们成功地合成了很多甜味物质。在合成这些物质的过程中, 发现有很多现象并不能完全用 Sellenberger、Kier 等人的理论来解释。

本文对 13 种呈味氨基酸进行了量子化学计算, 并对其电荷、能量等量子化学参数与甜味的关系进行相关分析, 以揭示氨基酸类物质的分子结构与甜味的关系, 为甜味物质的合成提供新的理论和途径。

1 计算方法

氨基酸分子的量子化学计算, 采用全略微

分重叠法 (Complete Neglect of Differential Overlap method, CNDO), 程序在 IBM-PC 机上用 FORTRAN 77 语言编成^[4], 使用华南理工大学计算中心 HONEYELL DPS-8 计算机进行计算。

2 结果与讨论

2.1 氨基酸甜味比较

大多数氨基酸都有一定的味感, 将强甜味、甜味、弱甜味、微甜味分别以数量化值 4、3、2、1 代表。苦味、微苦味相应以 -3 和 -1 代表。对 13 种氨基酸的味感进行评比的结果列于表 1。可看出, 在这 13 种氨基酸中最简单的甘氨酸呈现比较强的甜味。在 L-型氨基酸中, 只有 L-丙氨酸显示较强的甜味, 丝氨酸、苏氨酸微有甜味, 其他 L-型氨基酸几乎都有苦味, 与此相应的 D-型氨基酸几乎都有甜味。

2.2 氨基酸味感与量子化学参数的关系

用 CNDO/2 法对 13 种氨基酸进行量子化学计算, 并对其共有结构 (如图 1 所示) 的量子化学参数 (包括单原子数据、双原子数据) 进行分析。

2.2.1 氨基酸单原子数据与甜度的关系

对氨基酸单原子数据 (EA、EAU、EAJ、EAK、Q) 与甜度的关系进行相关分析。氨基酸甜度用表 1 列出的味感值代表。回归分析结果

列于表 2。

表 1 各种氨基酸的味感^[2]

	L-型	味感值	D-型	味感值		L-型	味感值	D-型	味感值
甘氨酸	甜味	3	甜味	3	亮氨酸	苦味	-3	强甜味	4
丙氨酸	甜味	3	强甜味	4	异亮氨酸	苦味	-3	甜味	3
丝氨酸	微甜味	1	强甜味	4	色氨酸	苦味	-3	强甜味	4
苏氨酸	微甜味	1	弱甜味	2	酪氨酸	微苦味	-1	甜味	3
蛋氨酸	苦味	-3	甜味	3	苯丙氨酸	微苦味	-1	强甜味	4
组氨酸	苦味	-3	甜味	3	赖氨酸	苦味	-3	弱甜味	2
缬氨酸	苦味	-3	强甜味	4					

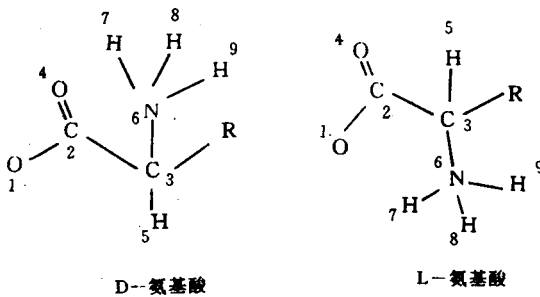


图 1 氨基酸共有结构的分子式及各原子编号

表 2 氨基酸单原子数据与甜度回归分析

原子 编号	γ 值				
	EA	EAU	EAJ	EAK	Q
1	0.1481	0.0281	0.1004	0.0276	0.0357
2	0.1371	0.0011	0.1481	0.0184	0.0023
3	0.0259	0.1664	0.0585	0.1417	0.0791
4	0.2039	0.0154	0.0012	0.1808	0.1463
5	0.0912	0.0022	0.0982	0.0907	0.0928
6	0.3753	0.3508	0.0685	0.3877	0.3128
7	0.2322	0.2321	0.2130	0.2728	0.2358
8	0.3225	0.3275	0.3350	0.3377	0.3257
9	0.2663	0.7556**	0.7535**	0.7537**	0.7537**

注: $f=24$, $\gamma_{0.05}=0.4062$, $\gamma_{0.01}=0.4958$; $EA=EAU+EAJ+EAK$; EA: A 原子能量; Q: A 原子电荷

氨基酸单原子数据回归分析结果表明:1—

9 号原子中, 9 号原子 EAU、EAJ、EAK、Q 与氨基酸甜度极显著相关 ($P<0.01$)。其相关系数分别为 0.7556、0.7535、0.7537、0.7537 ($n=26$, $\gamma_{0.01}=0.4958$)。其余原子的 EA、EAU、EAJ、EAK、Q 与氨基酸甜度均不相关。

2.2.2 氨基酸双原子数据与甜度的关系

Shallenburger 等人^[1]认为: 氨基酸等甜味物质是以氢供给基 (AH) 和氢接受基 (B) 与甜味接受体的这两个基团, 以氢键结合而产生的。氨基酸共有的结构中 4 号氧原子为氢接受基, 5、7、8、9 号氢原子均可能为氢供给基。因此对 4~5、4~6、4~7、4~8、4~9 号原子的双原子数据进行了分析。氨基酸 1~9 号原子相互间的距离, 除了 5~1、2、3、4、6、7、8、9 号原子之间, 4~7、8、9 号原子之间有改变外, 其余原子间的距离均无改变。由于原子间的距离变化是导致原子间能量、电荷变化的根本原因, 所以对 4~7、4~8、4~9、5~1、5~2、5~3、5~4、5~6、5~7、5~8、5~9 号原子的双原子数据进行分析。回归分析结果见表 3。

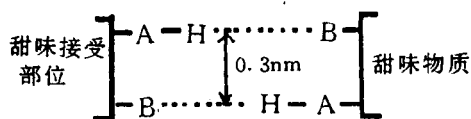
对上述原子的双原子数据进行回归分析的结果表明: 5 号氢原子与 4 号氧原子间的距离与氨基酸甜度极显著相关 ($P<0.01$), 其相关系数为 0.6859 ($n=13$, $\gamma_{0.01}=0.6835$), 5 号氢原子与 2 号碳原子间 EJ、EV、EC 与氨基酸甜度显著相关 ($P<0.05$)。

表 3 氨基酸双原子数据回归分析结果

双原子 编号	立体 构型	γ 值						
		原子间距	EAB	ER	EK	EV	EJ	EC
4~7	L	0.2192	0.0714	0.0287	0.3199	0.0897	0.1841	0.0426
	D	0.5224	0.1275	0.1818	0.1649	0.2089	0.2636	0.1790
4~8	L	0.3272	0.1747	0.2523	0.2335	0.2572	0.3231	0.2278
	D	0.4003	0.4866	0.4866	0.5231	0.3238	0.3271	0.3316
4~9	L	0.1782	0.3380	0.2695	0.1719	0.3159	0.3355	0.2938
	D	0.2811	0.2517	0.3165	0.2718	0.2293	0.2315	0.2282
5~1	L	0.4805	0.2649	0.4303	0.5255	0.1794	0.2514	0.4805
	D	0.0760	0.2745	0.0419	0.1231	0.2015	0.1793	0.0760
5~2	L	0.4805	0.2986	0.2452	0.1142	0.5543*	0.5632*	0.5634*
	D	0.0760	0.0395	0.2845	0.2166	0.2836	0.2887	0.2799
5~3	L	0.4805	0.2154	0.2563	0.2721	0.1676	0.2760	0.2680
	D	0.0760	0.0369	0.2787	0.2838	0.1797	0.1177	0.0749
5~4	L	0.6859**	0.1835	0.1839	0.3473	0.2465	0.2041	0.2733
	D	0.0007	0.2800	0.1793	0.2929	0.2779	0.2971	0.2742
5~6	L	0.4673	0.4178	0.4844	0.4742	0.1023	0.0665	0.4805
	D	0.0673	0.2757	0.1884	0.3103	0.2204	0.2063	0.0760
5~7	L	0.2502	0.2205	0.2047	0.0175	0.2740	0.3077	0.2459
	D	0.5107	0.5293	0.5268	0.0092	0.4901	0.4636	0.5138
5~8	L	0.3404	0.3233	0.3300	0.1719	0.3280	0.3118	0.3397
	D	0.1846	0.1760	0.1961	0.0000	0.2204	0.2495	0.1851
5~9	L	0.2502	0.3405	0.3146	0.2884	0.1383	0.0282	0.2459
	D	0.2754	0.2651	0.2764	0.2547	0.2619	0.2351	0.2753

注: $f=11$, $\gamma_{0.05}=0.5529$, $\gamma_{0.01}=0.6836$; $EAB=ER+EK+EJ+EV+EC$ 其中 EAB: A、B 两原子间能量; ER: 共振积分能贡献; EK: 交换积分能贡献; EJ: Coulomb 积分能贡献, 即两原子的电子云间的经典排斥能; EV: 电子与芯间排斥能; EC: 芯排斥能

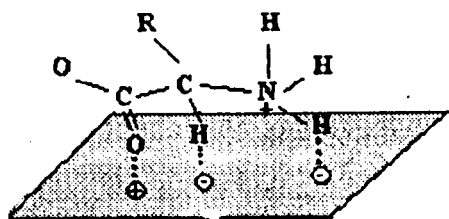
Shallenburger 等人认为: 甜味物质都有氢供给基 (AH) 和氢接受基 (B) 存在, 它们之间的距离为 0.25~4nm。而在甜味物质受体方面也有这两个基团存在, 它们彼此形成氢键, 而甜味的强弱与氢键强度有关^[1]。如图所示:



对氨基酸双原子数据回归分析的结果发现: 5 号氢原子与 4 号氧原子距离与 L 型甜度极显著相关 ($P<0.01$)。5 号氢原子为氢供给基, 4 号氧原子为氢接受基, 它们之间的距离为 0.3106~0.3138nm。它们与甜味受体方面的 AH、B 基团间, 彼此形成氢键。但未发现 4 号氧原子、5 号氢原子的能量与甜度的相关性 (由氨基酸单原子数据回归分析得, 见表 3)。

对氨基酸单原子数据回归分析的结果表

明: 9 号氢原子的 EAV、EAJ、EAK、Q 与氨基酸甜度极显著相关 ($P < 0.01$)。由此可以推断: 氨基酸可能以 4 号带负电荷的氧原子、5 号带正电荷的氢原子, 首先与甜味受体上带正电的 AH、带负电的 B 基团结合, 9 号带正电的氢原子与甜味受体上第 3 点结合。图示如下:



由于 9 号氢原子的 EAU、EAJ、EAK、Q 与氨基酸甜度极显著相关, 因此 9 号氢原子的 EAU、EAJ、EAK、Q 的大小部分决定了氨基酸甜度的大小。EAU、EAK、EAJ 为衡量原子能量的 3 方面, Q 为原子电荷。9 号氢原子能量越大, 电荷越大, 则 9 号氢原子与第 3 点结合形成的氢键强度越强, 氨基酸甜度就越大。

5 号氢原子与 9 号氢原子间的距离、4 号氧原子与 9 号氢原子间的距离均与氨基酸甜度不相关 (由双原子数据回归分析得, 见表 3)。因此, 9 号氢原子与甜味受体结合的第 3 点是在一定范围内的不定点。4~9 号原子间的距离

为 0.3849~0.3866nm, 5~9 号原子间的距离为 0.2758~0.2774nm。氨基酸甜度并不决定于 9 号氢原子与甜味受体第 3 点的结合位置, 而是决定于它们形成的氢键强度。

对氨基酸 R 基电荷回归分析结果表明: R 基电荷与甜度不相关。这说明 R 基对氨基酸甜度的影响并不直接由 R 基电荷决定。氨基酸 1~9 号原子为氨基酸共有结构。若不考虑 R 基, 则 1~9 号原子相互间的距离、位置应是相同的。由于 R 基不同, 影响到其共有结构原子及原子间的参数, 使其发生变化。R 基对甜度的影响, 通过 R 基对 9 号氢原子的作用, 使它的能量、电荷发生变化而体现出来。

参考文献

- 1 Shellenberger, RS. & T. E. Acton et al. Molecular theory of sweet taste. *Nature*, 1967, 216: 480.
- 2 Shellenberger, RS. et al, A lipophilic-hydrophobic attribute and component in the stereochemistry of sweetness. *Nature*, 1977, 221: 555.
- 3 Kier, LB. A molecular theory of sweet taste. *J. Pharm. Sci*, 1972, 61: 1394.
- 4 陈志行编. 有机分子轨道理论. 山东科学出版社, 1991.
- 5 Tako Kaniko. Taste of amino acids. *J. Chem. Sci. Japan*, 1939, 60: 531.

绿色蔬菜汁中叶绿素稳定性研究

孙鹤 丛培君 王榕树 天津大学化工系 300072

林世杨 江苏石油化工学院 213016

摘 要 对影响新鲜菠菜汁中叶绿素稳定性的 pH 值、光、温度、氧、微生物等因素及其相互作用进行了研究, 结果表明: 紫外光照对新鲜菠菜汁中叶绿素的稳定性影响最显著, 其次为微生物因素和氧因素, pH 值和温度影响不很明显; 微生物及氧化因素间的相互作用影响较强, 而其它因素间的相互作用近可忽略。

关键词 叶绿素 稳定性