

СПОСОБ ОЦЕНКИ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ СОЕДИНЕНИЯ ПО КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМ ПОКАЗАТЕЛЯМ

Яркова Т.А., Гюльмалиев А.М.

*ФГБОУ ВО «Московский государственный университет технологий
и управления им. К.Г. Разумовского (ПКУ)»
109004, Россия, г. Москва, ул. Земляной вал, 73;
e-mail: t.yarkova@mgutm.ru*

Оценка антиокислительной активности (АОА) веществ является актуальной задачей для химии, биологии, медицины. Экспериментальные методы, применяемые для этой цели весьма разнообразны, однако, стоит отметить, что диапазон результатов широк и они не всегда сопоставимы. Поэтому перед исследователем стоит задача выбора метода оценивания АОА. Альтернативой эксперименту может стать метод, основанный на результатах квантово-химических расчетов электронной структуры молекул антиоксидантов. Расчёт осуществлялся на примере химических структур, АОА которых является общепризнанной (тролокс, кверцетин, галловая и аскорбиновая кислоты и др.). Энергетические характеристики молекул определялись методом DFT B3LYP/6-31G(d,p) по программе [1] с полной оптимизацией энергии и расчетом частот нормальных колебаний. Рассчитанные энергии высшей занятой ЕВЗМО и низшей вакантной $E_{\text{НВМО}}$ молекулярных орбиталей, электротрицательность (χ), «химическая жесткость» (η) и электрофильность (ω) играют важную роль в химической стабильности молекулы и позволяют делать вывод о возможности передачи или приема электрона. По рассчитанным индексам реакционной способности антиоксидантов построены их зависимости от энергии нижней вакантной молекулярной орбитали. Полученные зависимости описываются линейными уравнениями с хорошими коэффициентами корреляции. Например, для электроотрицательности такая зависимость имеет вид:

$$\chi = -13.453 E_{\text{НВМО}} + 64.691; (R^2 = 0.8672)$$

По результатам квантово-химических расчетов значения ЕНВМО, сравниваются показатели выбранного реперного антиоксиданта (эталона) и веществ, АОА которого нужно оценить. Наиболее удобно использовать графический способ сравнения: соединения, индексы реакционной способности которых на графике зависимости χ , η , ω от $E_{\text{НВМО}}$ лежат слева от эталона проявляют более слабые антиоксидантные свойства, справа – более сильные. Разница в индексах может служить критерием количественной оценки относительной активности антиоксидантов.

Литература

1. Granovsky A.A. GAMESS v.7.1. (<http://classic.chem.msu.su/gran/games/index.html>)