

## МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНОЇ СТРУКТУРИ І РОЗРАХУНОК ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОНЕНТІВ РОСЛИННОЇ СИРОВИНИ МЕТОДОМ КХР

*Мощенко А. С., Чигиринець О. Е.*

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», Київ, Україна  
shakun.anastasiya.xd41@gmail.com

При дослідженні антиоксидантної властивості будь-якого рослинного екстракту важко передбачити основні сполуки антиоксидантної дії, в першу чергу за рахунок багатокомпонентного складу. Тому залишається не відомим, які із сполук, що входять до складу екстракту жмиху абрикосу, вносять найбільший внесок у його антиоксидантну здатність. Метою роботи є проведення прогностичної оцінки антиоксидантної здатності на основі розрахунку електронних та термодинамічних характеристик молекул.

Для визначення ефективної дії досліджуваних речовин за допомогою квантово-хімічних розрахунків (КХР) необхідно оптимізувати їх молекулярну структуру і визначити фізико-хімічні властивості: загальну енергію, електронні заряди на атомах. Для дослідження були використані наступні сполуки: хлорогенова кислота, кверцетин, епікатехін, катехін, бензойна кислота, галова кислота.

Фізико-хімічні параметри, включаючи  $H_g$ , енергію вищої зайнятої молекулярної орбіталі ( $E_{vmo}$ ) та енергію найнижчої незайнятої молекулярної орбіталі ( $E_{nmo}$ ), розраховували після проведення оптимізації геометрії та мінімізації енергії за допомогою напівемпіричного MNDO методу. Метод MNDO був обраний через його надійну точність. Значення  $H_g$ ,  $E_{nmo}$  та  $E_{vmo}$  відповідних радикалів антиоксидантів розраховували за допомогою радикалів, отриманих субстракцією атома водню з належної фенольної гідроксильної групи.

ВЗМО містить електрони, таким чином,  $E_{vmo}$  демонструє електронодонорну здатність молекули. Значення  $E_{vmo}$  для сполук збільшуються в наступному порядку: хлорогенова кислота, кверцетин, епікатехін, катехін, бензойна кислота, галова кислота. З іншого боку,  $E_{nmo}$  характеризує електронно-акцепторну здатність сполуки. Значення  $E_{nmo}$  для сполук зменшуються в наступному порядку: хлорогенова кислота, бензойна кислота, галова кислота, кверцетин, епікатехін, катехін.

Малий енергетичний розрив між ВЗМО і НВМО збільшує антирадикальну активність. Енергетична щілина між ВЗМО та НВМО, також дає інформацію про її реактивність. Більша енергетична щілина вказує на нижчу хімічну реактивність та вищу кінетичну стійкість досліджуваних сполук. Значення енергетичного розриву для сполук збільшуються в наступному порядку: хлорогенова кислота, бензойна кислота, галова кислота, епікатехін, катехін, кверцетин.

Таким чином квантово-хімічні дескриптори, такі як твердість, електронегативність, індекс електрофільності, можуть давати важливу інформацію про антиоксидантну здатність досліджуваних сполук. Для наведених квантово хімічних характеристик спостерігається єдина закономірність: при зменшенні величини параметру збільшується реакційна здатність (антирадикальна активність) сполуки. Молекула, що характеризується низькою твердістю, електронегативності та індексом електрофільності класифікується як найбільш реакційна здатна молекула. З проаналізованих характеристик виходить, що сполука катехін має найбільш виражені антиоксидантні властивості.

Також для порівняння були розраховані основні представники класу синтетичних антиоксидантів, такі як ВНА, ВНТ показали розраховані дескриптори на рівні натуральних антиоксидантів фенольної групи.