

## **Дослідження будови і властивостей біофлавоноїдів методами комп'ютерної хімії**

**Наталія Стеценко, Галина Сімахіна**

*Національний університет харчових технологій, Київ*

[n.st71@mail.ru](mailto:n.st71@mail.ru)

**Вступ.** Серед вивчених на сьогодні біофлавоноїдів найвищою біологічною активністю відзначаються кверцетин та рутин [1]. Ці ж сполуки містяться у найбільших кількостях в багатьох рослинних об'єктах. Тому за ступенем їхньої біологічної активності можна загалом оцінити ефективність того чи іншого природного джерела біофлавоноїдів.

Метою даної роботи є дослідження просторової будови, енергетичних характеристик та реакційної здатності молекул кверцетину та рутину методами комп'ютерної хімії. Методи молекулярної механіки, квантової хімії дають можливість розрахувати геометричні параметри молекул та їхні енергетичні характеристики, які будуть адекватні експериментальним даним [2].

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

**Результати.** 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 оптимальної геометричної будови шляхом пошуку мінімального значення енергії залежно від координат атомів.

Встановлено, що просторове розташування атомів в молекулі кверцетину утворює практично плоску структуру. За межі площини, утвореної фенольними кільцями, не виходять жодні атомні групи. Просторова будова молекули рутину є більш складною та об'ємною, в першу чергу за рахунок наявності радикалу рутинози. Він розміщується в просторі під кутом  $117^\circ$  до площини остову флавоноїдів. З результатів розрахунків можна зробити висновки про те, що відстані між атомами, які входять до фенольних кілець обох флавоноїдів, практично однакові. На відміну від цього, значення валентних кутів дещо відрізняються, що можна пояснити взаємодією атомів остову рутину з атомами радикалу рутинози.

Також було визначено енергетичні характеристики молекул кверцетину і рутину, 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. Встановлено, що молекула кверцетину стабільніша за молекулу рутину. На це вказують менші значення загальної енергії та її складових частин. Важливо відмітити, що величини енергій зв'язків для обох молекул близькі за значеннями, тоді як енергія валентних кутів рутину

вдвічі більша, ніж у кверцетину. Це підтверджує припущення про те, що наявність радикалу рутинози в молекулі рутину не впливає на відстані між атомами, але змінює їхнє розташування в просторі.

Для прогнозування властивостей та реакційної здатності біологічно активних сполук можна застосовувати квантово-хімічні уявлення, враховуючи електростатичні (кулонівські) взаємодії між електронами і ядрами. На даному етапі роботи встановлено взаємозв'язок між електронною будовою флавоноїдів та їх здатністю вступати в одноелектронні реакції з вільними радикалами за рахунок відщеплення протонів від гідроксильних груп.

Визначено, що в молекулі рутину біля фенольних кілець міститься на одну гідроксильну групу менше, ніж в молекулі кверцетину. Аналіз розподілу електронних зарядів на атомах оксисену гідроксильних груп свідчить про те, що кверцетин буде швидше і легше вступати в реакції з вільними радикалами за рахунок відщеплення протонів. Отже, розрахунки електронної будови молекул двох флавоноїдів дали можливість пояснити і підтвердити більш високу антиоксидантну активність кверцетину порівняно з рутином.

**Висновки.** На прикладі вивчення просторової та електронної будови молекул кверцетину та рутину можна стверджувати, що в біомембранах клітин ефективність антиоксидантної дії біофлавоноїдів визначається особливостями структурної організації їх молекул. Молекула кверцетину містить більшу кількість гідроксильних груп порівняно з молекулою рутину, а також має менші значення електронних зарядів на відповідних атомах. Це свідчить про його здатність значно легше вступати в реакції з вільними радикалами, відщеплюючи протони гідроксильних груп. Розрахунки електронної будови молекул двох найважливіших флавоноїдів дали можливість пояснити більш високу антиоксидантну активність кверцетину.

#### **Література**

1. Лапин, А.А. Антиоксидантные свойства продуктов растительного происхождения / А.А. Лапин, М.Ф. Бортников, А.П. Карманов // Химия растительного сырья. – 2007. – №2. – С. 79-83.
2. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия. / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с.