

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ХАРЧОВИХ ТЕХНОЛОГІЙ

**Національному університету харчових
Технологій 130 років**

**МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА
КОНФЕРЕНЦІЯ**

***„ОЗДОРОВЧІ ХАРЧОВІ ПРОДУКТИ ТА ДІЄТИЧНІ
ДОБАВКИ: ТЕХНОЛОГІЇ, ЯКІСТЬ ТА БЕЗПЕКА”***

ЗБІРНИК МАТЕРІАЛІВ

22-23 травня 2014 р.

КИЇВ НУХТ 2014

3. Використання методів комп'ютерної хімії для вивчення будови і властивостей біологічно активних речовин

Наталія Стеценко

Національний університет харчових технологій

Вступ.

Комп'ютерна хімія – це інформативний метод отримання даних щодо будови і властивостей речовин, який ґрунтується на використанні математичних методів для обчислення параметрів молекулярних структур, фізико-хімічних властивостей та реакційної здатності хімічних сполук. В основі комп'ютерної хімії знаходяться три потужних комплекси методів: молекулярної механіки, молекулярної динаміки, а також квантової хімії. Метод молекулярної механіки ґрунтується на законах пружності, які описують взаємодії, що приводять до поєднання атомів в молекулі. Метод квантової хімії враховує електронно-ядерну будову атомів, кулонівські взаємодії електронів і ядер. Молекулярна динаміка ґрунтується на законах класичної механіки [1].

На властивості і реакційну здатність біологічно активних речовин суттєво впливає їхня просторова будова. Методи молекулярної механіки, квантової хімії дають можливість розрахувати геометричні параметри молекул та їхні енергетичні характеристики, які будуть адекватні експериментальним даним.

Метою даної роботи є визначення та порівняння просторової, електронної будови, енергетичних характеристик та реакційної здатності антоціанів–ціанідину, пеларгонідину та дельфінідину.

Матеріали і методи. Досліджено просторову та електронну будову молекул антоціанів у вигляді радикалів, хінонів та гідратованих сполук. Для цього застосовували програмний пакет HyperChem. Він дозволяє проводити дослідження просторової будови біологічно активних сполук, їх енергетичних характеристик, реакційної здатності та властивостей. Програмний комплекс зручний у використанні, має розвинений інтерфейс, дозволяє обмін інформацією з іншими програмами. Перевагою використання методу комп'ютерного моделювання будови біологічно активних речовин є швидкість та простота отримання результатів, точність яких збігається з точністю експериментальних вимірювань [2].

Результати. Завдання комп'ютерної програми, яка реалізує методи молекулярної механіки та квантової хімії, полягає у розрахунку енергетичних характеристик молекули та у знаходженні оптимальної геометричної будови шляхом пошуку мінімального значення енергії залежно від координат атомів.

Встановлено, що з переходом від пеларгонідину до дельфінідину загальна енергія зменшується як для вихідних сполук, так і для радикалів, хінонів та гідратованих молекул. Наприклад, для вихідних сполук пеларгонідину загальна енергія дорівнює –3406,93 еВ, для ціанідину – 3700,68 еВ, а для дельфінідину –3994,43 еВ. Такі зміни пов'язані зі збільшенням у цій послідовності кількості валентних електронів. Так, для вихідних сполук існує 100, 106 і 112 електронів відповідно для пеларгонідину, ціанідину та дельфінідину.

Найбільш стабільними є гідратовані сполуки антоціанів. Відповідні значення загальної енергії гідратованих сполук склали: пеларгонідин –3429,57 еВ, ціанідин – 3723,37 еВ, дельфінідин – 4017,17 еВ. Для пеларгонідину, наприклад, загальна енергія з переходом від вихідного до гідратованого стану зменшується від –3406,9 до –3429,6 еВ. Аналогічні зміни спостерігаються для ціанідину та дельфінідину. Навпаки, окислення катіону молекули антоціану до стану хінону призводить до

збільшення енергії (для ціанідину, наприклад, від -3700,7 до -3691,1 eV). Отже, хінон є менш стабільною сполукою порівняно з вихідним катіоном, його подальше перетворення, у тому числі й руйнування, сприяє утворенню стабільнішої структури.

Також було досліджено зв'язок між електронною будовою антоціанів та їх здатністю вступати в одноелектронні реакції з вільними радикалами. Було визначено розподілення електронних зарядів на атомах, що утворюють гідроксильні групи, які взаємодіють з неспареним електроном вільних радикалів. У молекулі пеларгонідину найбільшою є ймовірність відщеплення протона від гідроксильних груп та взаємодія з вільним радикалом. На це вказують відносно невисокі значення електронних зарядів на атомах кисню гідроксильних груп даної сполуки. Отже, молекула пеларгонідину буде швидше та легше вступати в реакції з вільними радикалами за рахунок відщеплення протонів гідроксильних груп. Це зумовлює більш високу антиоксидантну активність зазначеної сполуки.

Висновки. В результаті проведених досліджень встановлено, що з трьох проаналізованих молекул антоціанів, а саме пеларгонідину, ціанідину та дельфінідину, найбільш стабільною є молекула дельфінідину. Всі гідратовані сполуки є стабільнішими, ніж їх вихідні форми. Найменш стійкими є хінонні форми досліджених молекул, що свідчить про можливість їх легкого перетворення і руйнування. Молекула пеларгонідину буде швидше та легше вступати в реакції з вільними радикалами за рахунок відщеплення протонів гідроксильних груп, що зумовлює більш високу антиоксидантну активність зазначеної сполуки.

Література

1. Бутырская, Е.В. Компьютерная химия: основы теории и работа с программами Gaussian и GaussView/ Е.В. Бутырская. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2011. – 244 с.
2. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: СОЛОН-ПРЕСС, 2005. – 536 с.