**Структура и реакционная способность водородных комплексов протокатеховая кислота–моносахарид в реакции с 2,2ꞌ-дифенил-1-пикрилгидразилом**

***Будникова Е.А.***

*Аспирантка, 2 год обучения*

*Донецкий государственный университет,*

*химический факультет, Донецк, Россия*

*E-mail:* *bbkatyy@mail.ru*

Целью данной работы является исследование структуры водородных комплексов природной протокатеховой кислоты (ArOH) c моносахаридами (Sacch), а также реакционной способности названных комплексов в реакции с радикалом 2,2ꞌ-дифенил-1-пикрилгидразилом (DPPH•) в водных средах с различным уровнем pH.

Для характеристики синергического эффекта использовали параметры, определенные по начальной скорости реакции фенолов, сахаридов и их смесей с DPPH• методом фотоколориметрии:

1) $SE\_{max}$ – усиление антирадикального действия смеси по сравнению с аддитивным действием фенола и углевода;

2) $S$ – усиление антирадикального действия смеси по сравнению с действием протокатеховой кислоты, взятой в концентрации, равной сумме концентраций фенола и сахарида в смеси.

Установлено (Таблица 1), что в кислых средах бинарные композиции протокатеховой кислоты с моносахаридами (галактозой, маннозой) проявляют выраженный антирадикальный синергический эффект в реакции с 2,2ʹ-дифенил-1-пикрилгидразилом. Синергические свойства фенольно-сахаридных смесей снижаются с ростом pH среды.

Таблица 1. Эффекты синергизма ($SE\_{max}$ и $S$) бинарных композиций протокатеховая кислота – моносахарид в реакции с DPPH• в водных средах с разным pH

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Моносахарид | pH = 2 | pH = 7.35 | pH = 9 |
| *SE*max, % | *S* | *SE*max, % | *S* | *SE*max, % | *S* |
| глюкоза | 23.2±0.9 | 0.86 | 9.8±0.4 | 0.77 | 4.51±0.18 | 0.73 |
| галактоза | 58.0±1.7 | 1.11 | 18.4±0.7 | 0.83 | 4.90±0.19 | 0.73 |
| манноза | 41.3±1.4 | 1.05 | 12.0±0.4 | 0.78 | 4.51±0.18 | 0.73 |
| фруктоза | 24.9±0.9 | 0.87 | 9.9±0.3 | 0.77 | 3.69±0.11 | 0.73 |
| сорбоза | 28.4±0.9 | 0.90 | 8.2±0.3 | 0.76 | 3.80±0.11 | 0.73 |
| арабиноза | 17.7±0.7 | 0.82 | 3.9±0.12 | 0.73 | 1.02±0.05 | 0.71 |
| ксилоза | 21.0±0.8 | 0.85 | 5.1±0.2 | 0.74 | 1.81±0.06 | 0.71 |
| рибоза | 7.8±0.3 | 0.75 | 3.50±0.12 | 0.72 | -(2.09±0.06) | 0.69 |

Примечание. Соотношение фенол–сахарид в растворе 70:30 об % с суммарной концентрацией смеси в буфере с pH 2 – 5×10-3 моль/л, в буфере с pH 7.35 – 5×10-5 моль/л, в буфере с pH 9 – 3×10-5 моль/л

Методами ЯМР-спектроскопии, разностной УФ-спектроскопии и теории функционала плотности показано, что механизм синергизма заключается в образовании межмолекулярных водородных комплексов фенол–моносахарид. Комплексы донорного и донорно-акцепторного типов имеют энергии ионизации ниже, чем у протокатеховой кислоты и, соответственно, активнее взаимодействуют с радикалом по сравнению с исходным антиоксидантом.

$$ArОН∙∙∙Sacch + DPPH^{•}\rightarrow \left[ArОН∙∙∙Sacch\right]^{•+} + DPPH^{–}$$

Менее реакционноспособны акцепторные ион-молекулярные комплексы с энергиями ионизации выше, чем у реагентов. Синергизм, установленный в фенольно-сахаридных смесях, вызывает особый интерес, так как подразумевает достижение многоцелевого терапевтического эффекта при использовании меньшего количества компонентов смеси, а также снижение числа побочных реакций.