**Антирадикальная и синергическая активность пентадигаллоилглюкозы в композициях с мономерными растительными фенолами**

***Михайлова Н.В.***

*Студентка, 1 курс магистратуры*

*Донецкий государственный университет, химический факультет, Донецк, Россия*

*E-mail: natasha.mikhaylova.2001@mail.ru*

Целью данной работы является исследование антирадикальной и синергической активности пентадигаллоилглюкозы (PDGG) и мономерных ($Ar\_{1}OH$) форм растительных фенолов в индивидуальном виде и в составе бинарных композиций в реакции с модельным N-центрированным радикалом 2,2ꞌ-дифенил-1-пикрилгидразилом ($DPPH^{•}$).

Величину синергического эффекта ($SE$) оценивали методом фотоколориметрии по усилению антирадикального действия смеси по сравнению с аддитивным действием фенолов:

$$SE=\left({\left(w\_{0(смесь)}-w\_{адд.}\right)}/{w\_{адд.}}\right)∙100\% =\left({∆w}/{w\_{адд.}}\right)∙100\% ,$$

где $w\_{0(смесь)}$ – начальная скорость реакции $DPPH^{•}$со смесью PDGG и $Ar\_{1}OH$, моль∙л-1∙с-1; $w\_{адд.}=w\_{0(Ar\_{1}OH)}+w\_{0(Ar\_{n}OH)}$ – величина начальной скорости в предположении, что действие смеси аддитивно, моль∙л-1∙с-1; $w\_{0(Ar\_{n}OH)}$ – начальная скорость реакции $DPPH^{•}$с PDGG при ее молярной концентрации, взятой в смеси, моль∙л-1∙с-1; $w\_{0(Ar\_{1}OH)}$ – начальная скорость реакции $DPPH^{•}$с $Ar\_{1}OH$ при его молярной концентрации, взятой в смеси, моль∙л-1∙с-1. Эффект считался зафиксированным, если *SE >* 0.

Таблица 1.Эффекты синергизма композиций PDGG с $Ar\_{1}OH$ в соотношении 90:10 об. % (при суммарной концентрации в смеси 8.2·10-5 моль/л) в реакции с $DPPH^{•}$ в бензоле

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| $$Ar\_{1}OH$$ | $w\_{0(смесь)}$, моль·л-1·с-1 | $SE\_{макс.}$, % | $S$ a |
| 3-пирогаллолкарбоновая  | 2.49·0-6 | 58.0±1.9 | 1.43 |
| галловая  | 1.71·10-6 | 62.2±1.9 | 1.0 |
| сиреневая | 1.87·10-6 | 89±3 | 1.09 |
| гентизиновая | 2.85·10-6 | 84±3 | 1.66 |
| протокатеховая | 2.45·10-6 | 142±5 | 1.43 |
| ванилиновая | 3.84·10-6 | 151±5 | 2.24 |
| салициловая | 1.47·10-6 | 49.2±1.5 | 0.86 |
| кофейная | 3.43×10-6 | 120±4 | 2 |
| феруловая | 3.65·10-6 | 137±4 | 2.13 |
| п-кумаровая  | 2.2·10-6 | 45.2±1.5 | 1.68 |
| вератровая b | 1.89·10-6 | 114±4 | 1.1 |

a величина $S=w\_{0(смесь)}/w\_{0(Ar\_{1}OH(100))}$ рассчитана при $w\_{\left(0\right)Ar\_{n}OH(100)}$ = 1.72×10-6 моль·л-1·с-1 в бензоле;

b величины$SE\_{макс.}$ и $S$ определены при соотношении 95:5 об. % (с суммарной концентрацией фенолов в смеси 8.2×10-5 моль·л-1).

Установлено, что бинарные композиции полимерной и мономерных форм растительных фенолов проявляют выраженную антирадикальную синергическую активность в реакции с $DPPH^{•}$ в бензоле (как липидоподобном растворителе). Максимальный синергический эффект (более 140 %) характерен для смесей PDGG с протокатеховой и ванилиновой кислотами при соотношении 90:10 об. % соответственно (Таблица 1). Методами квантовой химии и разностной УФ-спектроскопии показано, что результирующий эффект композиций PDGG с мономерными фенолами зависит от реализации двух механизмов синергического действия: первого – образования межмолекулярного Н-комплекса между реагентами, проявляющего более высокую антирадикальную активность, чем у исходных соединений, и второго – восстановления окисленных форм более слабого антиоксиданта (мономерного фенола) более сильным антиоксидантом (пентадигаллоилглюкозой). Перспективной синергической композицией с высокой антирадикальной активностью является смесь PDGG с метоксилированной формой растительного фенола (вератровой кислотой).