2. Alaca, F. G. Bazı tıbbi bitkilerdeki doğal antioksidanlar ve önemi / F. G. Alaca, ve O. Arabacı // Türkiye VI. Tarla Bitkileri Kongresi, Antalya, 2005. – P. 465–470.

AOAC, Official Methods of Analysis, 15th ed. Association of Official Analytical Chemists, Washington DC. – 1990.
*Biglari, F.* Antioxidant activity and phenolic content of various date palm (*Phoenix dactylifera*) fruits from Iran / F. Biglari, A. F. M. AlKarkhi, and A. M. Easa // Food Chemistry, 107 (4), 2008. – P. 1636–1641.

5. *Criado, M. N.* Comparative study of the effect of the maturation process of the olive fruit on the chlorophyll and carotenoid fractions of drupes and virgin oils from Arbequina and Fraga cultivars / M. N. Criado, M. J. Motilva, M. Goni, M. P. Romero // *Food Chemistry* 2, 2005. – 748–755.

6. *Mechergui, K.* Essential oils of *Origanum vulgare* L. subsp. *glandulosum* (Desf.) Ietswaart from Tunisia: chemical composition and antioxidant activity / K. Mechergui, J. A. Coelho, M. C. Serra, S. B. Lamine, S. Boukhchina, M. L. Khouja // *J Sci Food Agric*, 90, 2010. – P. 1745–1749.

7. Özcan, M. Antioxidant activity of extracts and essential oils from Turkish spices on sunflower oil / M. Özcan, A.Akgül // Acta Alimentaria, 24(1), 1995. – P. 81–90.

8. Özcan, A. Antioxidant activity of rosemary {*Rosmarinus officinaiis* L.) extracts on natural olive and sesame oils. *Grasas y Aceites*, 50 (5), 1999. P. 355–358.

9. *Pagliarini, E.* Sensory and instrumental assessment of olive oil appearance / E. Pagliarini // *Grasas y Aceites.* 45, 1994. – P. 62–64.

10. *Püskülcü, H.* Introduction Statistic (İstatistiğe Giriş) / H. Püskülcü, F.İkiz // Bilgehan Press, Bornova-İzmir, Turkey(in Turkish). – 1989.

### КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ И СИНТЕЗ НОВЫХ АЗОМЕТИНОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ, ОБЛАДАЮЩИХ АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

# QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION AND SYNTHESIS OF NEW AZOMETHINE COMPOUNDS WITH ANTIOXIDANT ACTIVITY

# *M. A. Атрошко*<sup>1</sup>, *C. H. Шахаб*<sup>1,2,3</sup> *M. Atroshko*<sup>1</sup>, *S. Shahab*<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, г. Минск, Республика Беларусь <sup>2</sup>Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси, г. Минск, Республика Беларусь <sup>3</sup>Институт химии новых материалов Национальной академии наук Беларуси, г. Минск, Республика Беларусь atroshkomikhail@gmail.com siyamakshahab@mail.ru <sup>1</sup>Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus

<sup>2</sup>Institute of Physical Organic Chemistry National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus <sup>3</sup>Institute of Chemistry of New Materials National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus

В работе приведены результаты квантово-химического моделирования новых азометинов перспективных в биологии, биохимии и медицине.

This publication represents some of the data obtained when applying the methods of quantum chemical modeling to azomethine structures, which are promising compounds for use in biological and medical sciences.

Ключевые слова: оптимизация, метод теории функционала плотности, антиоксидантная активность.

Keywords: optimization, density functional theory method, antioxidant activity.

Поиск перспективных препаратов, имеющих определенную биологическую активность, является одним из основных направлений научной деятельности в жизни человека в силу увеличения биоразнообразия микроорганизмов и растущего числа заболеваний, по мере открытия новых биохимических механизмов патологических процессов и модификация уже известных.

Молекулы, имеющие в своем составе –CH=N– связь применяются в неорганической, органической, аналитической, биологической химии и могут проявлять антиоксидантную, противомикробную, противораковую, противовоспалительную, противогельминтную, противогрибковую, противовирусную активность.

Выявление различных химико-биологических свойств соединений эмпирическим путем полезно для обнаружения биологической активности соединений, но такой подход часто дорог в применении и требует много времени и ресурсов. Прогресс в области компьютерного моделирования и программного обеспечения, а также в теоретической химии привел к тому, что высокопроизводительные вычислительные и графические инструменты стали доступны многим академическим и промышленным лабораториям [2]. Теоретические методы квантовой химии на основе теории функционала плотности (DFT) широко используются для расчета равновесной геометрии, электронного спектра, УФ-, ИК- и ЯМР спектров молекул. В последнее время DFT широко применялся для изучения биологических свойств оснований Шиффа и их производных, а также азотсодержащих оснований [1].

Предварительное квантово-химическое моделирование молекулы азометинов. Для расчетов использован персональный компьютер с процессором intel core i7 (2.21 GHz CPU) с установленной операционной системой Ubuntu 18.04. При вычислениях стартовой геометрии молекулы с азометиновым основанием выбран метод молекулярной механики (MM<sup>+</sup>) программного пакета HyperChem 08. Выбор метода MM<sup>+</sup> обоснован тем, что он разработан для органических молекул, учитывает потенциальные поля, формируемые всеми атомами рассчитываемой системы, и позволяет гибко модифицировать параметры расчета в зависимости от конкретной задачи. Стартовую геометрию молекулы дополнительно оптимизировали в среде растворителя N,N-диметилформамида (DMF) полуэмпирическим методом PM6 программного пакета Gaussian 16 до достижения глобального минимума полной энергии изучаемых систем. Для нахождения глобального энергетического минимума и наиболее устойчивых конформеров анализировали все стационарные точки на поверхности потенциальной энергии молекул. Методом PM6 находят оптимизирование конфигурации, общую энергию молекул, электронные свойства и энтальпию образования веществ [2]. Для визуализации результатов использована программа Gauss View 06. Равновесная геометрия молекулы полуэмпирическим методом PM6 приведена на рис. 1.



Рисунок 1 – Оптимизированная молекула методом РМ6

Полное квантово-химическое моделирование равновесной геометрии и электронной структуры молекулы азометинов. Полная оптимизация и расчет электронной структуры проводились неэмпирическим методом DFT/ RB3LYP в базисе 6-31++G. Данный метод используется для расчета оптимизированных геометрий, электронных абсорбционных спектров, значений полной энергии и теплоты образования и применен нами для расчета электронного спектра поглощения молекул новых азометинов. Электронный спектр молекулы 4-((E)-((4-((E)-фенилдиазенил) фенил) имино) метил) бензойной кислоты (А) рассчитан для 20 одноэлектронных возбуждений в области 240.13-533.25 нм. Результаты расчета абсорбционного спектра даны в табл. 1.

Максимальная длина волны с высокой силой осциллятора наблюдалась при  $\lambda = 432,52$  нм и f = 1.8784 (табл. 1, рис. 2, 3). Расчет показал, что самый сильный переход электрона наблюдается при максимуме поглощения 432.52 нм, который относится к переходу электрона в возбужденное синглетное состояние  $S_0 \rightarrow S_2$ . Остальные переходы имеют маленькое значение f и запрещены по симметрии.

Теоретический спектр поглощения оптимизированной молекулы в среде растворителя рассчитан с помощью программного пакета Gaussian 16, используя уровень теории RB3LYP/6-31++G. Усредненный масштабирующий коэффициент программы при расчете УФ спектров равен 0.99. Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы в среде растворителя представлен на рис. 2.

Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_1$	533,25	2,33	+0.64286(H-1→L) -0.28906(H-1→L+1)	0,00
$S_0 \rightarrow S_2$	432,52	2,90	+0.70511(H→L)	1,88
$S_0 \rightarrow S_3$	368,42	3,37	$+0.68193(H-4\rightarrow L) +0.13465(H-4\rightarrow L+1) +0.11583(H-4\rightarrow L+2)$	0,00
$S_0 \rightarrow S_4$	347,72	3,57	$+0.29315(H-1\rightarrow L) +0.63221(H-1\rightarrow L+1) +0.10116(H-1\rightarrow L+2)$	0,00
$S_0 \rightarrow S_5$	344,10	3,60	-0.15328(H-3→L) -0.23251(H-2→L) +0.64387(H→L+1)	0,01
$S_0 \rightarrow S_6$	336,55	3,68	$\begin{array}{c} -0.43971(\text{H-3}{\rightarrow}\text{L}) + 0.10924(\text{H-3}{\rightarrow}\text{L}{+1}) + 0.51528(\text{H-2}{\rightarrow}\text{L}) \\ -0.10830(\text{H-2}{\rightarrow}\text{L}{+1}) \end{array}$	0,02
$S_0 \rightarrow S_7$	329,52	3,76	+0.68557(H-5→L) +0.12883(H→L+4)	0,03
$S_0 \rightarrow S_8$	317,07	3,91	$ \begin{array}{c} +0.13109(\text{H-6}{\rightarrow}\text{L}) +0.50021(\text{H-3}{\rightarrow}\text{L}) +0.39245(\text{H-2}{\rightarrow}\text{L}) \\ +0.25951(\text{H}{\rightarrow}\text{L}{+1}) \end{array} $	0,02

Таблица 1 – Рассчитанный электронный спектр поглощения молекулы (A)

			П	родолжение табл. 1
Состояние	Длина волны, нм	Энергия перехода, эВ	Разложение волновых функций по однократно возбужденной конфигурации	Сила осциллятора (f)
$S_0 \rightarrow S_g$	307,41	4,03	$+0.66066(H-6\rightarrow L) +0.12442(H-6\rightarrow L+1) +0.11152(H\rightarrow L+3)$	0,03
$S_0 \rightarrow S_{10}$	285,80	4,34	$\begin{array}{c} -0.40196(\text{H-8}\rightarrow\text{L}) - 0.24223(\text{H-8}\rightarrow\text{L}+1) \\ +0.10984(\text{H-8}\rightarrow\text{L}+2) - 0.10064(\text{H-4}\rightarrow\text{L}) \\ +0.50026(\text{H-4}\rightarrow\text{L}+1) \end{array}$	0,00
$S_0 \rightarrow S_{II}$	284,32	4,36	$\begin{array}{c} +0.42398(\text{H-8}\rightarrow\text{L}) +0.25893(\text{H-8}\rightarrow\text{L}+1) \\ -0.10960(\text{H-8}\rightarrow\text{L}+2) -0.10134(\text{H-4}\rightarrow\text{L}) \\ +0.47164(\text{H-4}\rightarrow\text{L}+1) \end{array}$	0,00
$S_0 \rightarrow S_{12}$	273,27	4,54	$+0.16389(H-7\rightarrow L) +0.55534(H-5\rightarrow L+1)$ $+0.17944(H-3\rightarrow L+1) -0.32272(H-2\rightarrow L+1)$	0,00
$S_0 \rightarrow S_{I3}$	272,75	4,55	+0.39453(H-5→L+1) -0.26709(H-3→L+1) +0.48285(H-2→L+1)	0,01
$S_0 \rightarrow S_{14}$	271,08	4,57	+0.53321(H-7 $\rightarrow$ L) -0.12189(H-5 $\rightarrow$ L+1) -0.35991(H-3 $\rightarrow$ L+1) -0.11335(H-2 $\rightarrow$ L+1) +0.18188(H $\rightarrow$ L+2)	0,00
$S_0 \rightarrow S_{15}$	267,20	4,64	$\begin{array}{c} +0.24155(\text{H-}7\rightarrow\text{L}) +0.45923(\text{H-}3\rightarrow\text{L+}1) \\ +0.31986(\text{H-}2\rightarrow\text{L+}1) +0.30786(\text{H}\rightarrow\text{L+}2) \end{array}$	0,17
$S_0 \rightarrow S_{16}$	261,10	4,75	+0.20223(H-7 $\rightarrow$ L) -0.17168(H-6 $\rightarrow$ L) +0.57476(H-6 $\rightarrow$ L+1) -0.18035(H $\rightarrow$ L+2) +0.20749(H $\rightarrow$ L+3)	0,01
$S_0 \rightarrow S_{17}$	253,87	4,88	$\begin{array}{c} -0.23097(\text{H-}7\rightarrow\text{L}) + 0.25572(\text{H-}6\rightarrow\text{L}+1) \\ -0.10468(\text{H-}3\rightarrow\text{L}+1) - 0.12092(\text{H-}2\rightarrow\text{L}+1) \\ +0.54488(\text{H}\rightarrow\text{L}+2) - 0.11206(\text{H}\rightarrow\text{L}+4) \end{array}$	0,07
$S_0 \rightarrow S_{18}$	253,30	4,89	$\begin{array}{c} -0.10287(H-1 \rightarrow L+1) + 0.63620(H-1 \rightarrow L+2) \\ +0.11962(H-1 \rightarrow L+3) - 0.21900(H-1 \rightarrow L+4) \\ -0.10014(H-1 \rightarrow L+8) \end{array}$	0,00
$S_0 \rightarrow S_{19}$	245,56	5,05	$\begin{array}{c} +0.16885(H\text{-}1\text{-}L\text{+}2) +0.12957(H\text{-}1\text{-}L\text{+}3) \\ +0.66054(H\text{-}1\text{-}L\text{+}4) -0.10454(H\text{-}1\text{-}L\text{+}5) \end{array}$	0,00
$S_0 \rightarrow S_{20}$	240,13	5,16	$-0.21304(H-6\rightarrow L+1) + 0.57703(H\rightarrow L+3)$ $-0.29546(H\rightarrow L+4)$	0,00



Рисунок 2 – Спектр поглощения молекулы



Рисунок 3 – Виды молекулярных орбиталей, участвующих в образовании спектра поглощения молекулы (A) при λ = 432,52 нм

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Shahab, Siyamak & Sheikhi, Masoome & Filippovich, Liudmila & Dikusar, Evgenij & Yahyaei, Hooriye & Kumar, Rakesh & Khaleghian, Mehrnoosh. (2017). Design of Geometry, Synthesis, Spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, Excited State, Polarization) and Anisotropy (Thermal Conductivity and Electrical) Properties of New Synthesized Derivatives of (E,E)-Azomethines in Colored Stretched Poly (Vinyl Alcohol) Matrix. Journal of Molecular Structure. 1157. 10.1016/j. molstruc.2017.12.094.

2. Shahab, S., Sheikhi, M., Filippovich, L., Dikusar E., Yahyaei, H. Quantum chemical modeling of new derivatives of (E,E)-azomethines: synthesis, spectroscopic (FT-IR, UV/Vis, polarization) and thermophysical investigations, J. Mol. Struct. 1137 (2017) 335e348

### АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ ЭКСТРАКТОВ ЦВЕТОВ КАШТАНА (AESCULUS HIPPOCASTANUM L.), РЯБИНЫ (SORBUS AUCUPARIA L.), АКАЦИИ (ACACIA) И РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ СИРЕНИ (SYRINGA)

ANTIOXIDANT ACTIVITY OF EXTRACTS OF FLOWERS OF CHESTNUT (AESCULUS HIPPOCASTANUM L), ROWAN (SORBUS AUCUPARIA L.), ACACIA (ACACIA) AND DIFFERENT TYPES OF LILAC (SYRINGA)

# Д. А. Баскина<sup>1</sup>, Е. И. Тарун<sup>1</sup>, В. П. Курченко<sup>2</sup> D. Baskina<sup>1</sup>, E. Tarun<sup>1</sup>, V. Kurchenko<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, г. Минск, Республика Беларусь <sup>2</sup>Белорусский государственный университет, г. Минск, Республика Беларусь ktarun@tut.by <sup>1</sup>Belarusian State University, ISEI BSU, Minsk, Republic of Belarus <sup>2</sup>Belarusian State University, Minsk, Republic of Belarus

Проведено сравнительное изучение антиоксидантной активности экстрактов цветов акации, рябины, каштана и разных видов сирени. Получены зависимости интенсивности флуоресценции флуоресцеина от логарифма концентрации экстрактов цветов, из которых графически определены показатели IC<sub>50</sub>. Экстракты цветов акации, рябины и каштана восстанавливали флуоресценцию флуоресцеина до 98–100 % при концентрации образцов  $10^3-10^{-2}$  %. Экстракты цветов сирени восстанавливали флуоресценцию флуоресценцию флуоресцеина до 86–95 % при концентрации образцов  $10^{-1}-1$  %. Показатели IC<sub>50</sub> экстрактов цветов акации, рябины и каштана находились в пределах  $2\div5,3\cdot10^{-5}$  %, экстрактов цветов сирени – в пределах  $1,26\div7,31\cdot10^{-4}$  %. Максимальная антиоксидантная активность определена для экстракта акации.

The comparative study of the antioxidant activity of extracts of flowers of acacia, rowan, chestnut and different types of lilac was made. The dependence of the fluorescence intensity of fluorescein from the logarithm of the concentration of extracts of flowers obtained, of which graphically determined indicators IC<sub>50</sub>. Were received extracts of flowers of acacia, rowan and chestnut restored fluorescence of fluorescein to 98–100 % at a concentration of samples of  $10^{-3}$ – $10^{-2}$ %. Extracts of flowers restored the fluorescence of fluorescein to 86–95 % at a concentration of samples of  $10^{-1}$ –1%. The IC<sub>50</sub> of extracts of flowers of acacia, rowan and chestnut were within  $2\div5,3 \cdot 10^{-5}$ %, extracts of flowers of lilac – within  $1.26\div7.31 \cdot 10^{-4}$ %. The maximum antioxidant activity for acacia extract is determined.

*Ключевые слова:* антиоксидантная активность, экстракты цветов акации, рябины, каштана и разных видов сирени, флуоресцеин.

Keywords: antioxidant activity, extracts of flowers of acacia, rowan, chestnut and different types of lilac, fluorescein.

Избыточная концентрация свободных радикалов в организме является центральным фактором риска сердечно-сосудистых, онкологических заболеваний и других патологий. Флавоноиды обладают сильными антиоксидантными свойствами и могут использоваться для профилактики различных заболеваний. Биологически активные вещества, входящие в состав цветов акации, каштана, рябины и сирени, определяют их фармакологические свойства, что позволяет использовать их в качестве сырьевого источника для фармакологической промышленности. В цветках акации белой содержится гликозид робинин, а также ряд других флавоноидов [1]. В цветах рябины содержатся такие антиоксиданты, как гликозид кверцетина, рутин, кэмпферол, кофейная кислота и ее производные, изомеры хлорогеновой кислоты [2]. В цветах каштана содержится кверцетин, эпикатехин и кэмпферол, а также гликозиды кэмпферола, в частности ацилированный гликозид кэмпферола тилирозид [3]. Экстракты