**Реакции комплексообразования декагаллоилглюкозы с фенолкарбоновыми кислотами и их производными**

***Михайлова Н.В.***

*Студентка, 2 курс магистратуры*

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

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

Целью данной работы является исследование реакций комплексообразования декагаллоилглюкозы ($DGG$) в смесях с растительными фенолкарбоновыми кислотами и их производными ($ArOH$), а также изучение влияния указанного процесса на антирадикальную активность таннин-фенольных композиций ($DGG-ArOH$).

С использованием ЯМР-, ИК-Фурье- и УФ-спектроскопии зарегистрировано образование водородносвязанных комплексов в композициях DGG с $ArOH$.  Методом Джоба установлено образование ассоциата со стехиометрией 1:2:

$DGG +2ArOH ⇄DGG\cdots \left(ArOH\right)\_{2}$. (1)

По уравнению Бенеши-Гильдебранда в оригинальной и модифицированной (уравнение Скотта) формах определены константы устойчивости $(K\_{уст.})$ комплексов. Полученные изменения свободных энергий Гиббса реакций комплексообразования $(∆\_{r}G\_{298})$ свидетельствуют о том, что положение равновесия смещено в сторону образования ассоциата (табл. 1).

Таблица 1. Характеристики реакции комплексообразования (1) и антирадикальных синергических эффектов для таннин-фенольных композиций $DGG\cdots \left(ArOH\right)\_{2}$

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| $$ArOH$$ | Метод Бенеши-Гильдебранда | Метод Скотта | $\left(\frac{∆υ}{υ\_{адд.}}\right)\_{мак.}$, % | $\left(\frac{∆τ}{τ\_{адд.}}\right)\_{мак.}$, % |
| Kуст.∙10-7,моль-2∙л-2 | ∆rG298, кДж∙моль-1 | Kуст∙10-7,моль-2∙л-2 | ∆rG298, кДж∙моль-1 |
| протокатеховая | 9.7±0.9 | -46±4 | 8.7±0.9 | -45±5 | 85±3 | 107±4 |
| галловая | 6.8±0.7 | -45±5 | 7.3±0.7 | -45±4 | 66±3 | 108±4 |
| сиреневая | 10.2±0.7 | -46±3 | 10.7±1.1 | -46±5 | 89 ±4 | 171±6 |
| 3,5-диметокси-бензойная | 5.62±0.5 | -44±4 | 5.7±0.6 | -44±5 | 121±4 | 175±6 |

Методом фотоколориметрии по начальным скоростям реакций ($υ$) таннин-фенольных композиций срадикалом 2,2ʹ-дифенил-1-пикрилгидразилом ($DPPH^{•})$ установлено, что образование $DGG\cdots \left(ArOH\right)\_{2}$ является причиной проявления антирадикальных эффектов синергизма. Синергический эффект определяли по усилению антирадикального действия смеси по сравнению с аддитивным действием фенолов $\left(\frac{∆υ}{υ\_{адд.}}\right)\_{мак.}$(табл. 1). Наибольшие эффекты сверхаддитивности проявили композиции $DGG$ с метоксилированными фенолкарбоновыми кислотами – о-анисовой, 3,5-диметоксибензойной и вератровой кислотами. Между экспериментальными величинами констант устойчивости комплексов и эффектом синергизма таннин-фенольных смесей установлена линейная корреляционная зависимость (2) с коэффициентом корреляции порядка 0.900:

$\left(\frac{∆υ}{υ\_{адд.}}\right)\_{мак.}=\left(21.0\pm 3.7\right)∙lnK\_{уст.}-\left(308\pm 65\right).$ (2)

Эффекты сверхаддитивности композиций $\left(\frac{∆τ}{τ\_{адд.}}\right)$ подтверждаются и становятся более выраженными в реакции с природными пероксирадикалами, генерированными в процессе высокотемпературного автоокисления подсолнечного масла. Исследование параметров синергизма в органическом субстрате проводили методом иодометрического титрования по величине периода индукции окисления масла ($τ$). Наибольший синергический эффект, равный 175%, наблюдается для композиции декагаллоилглюкозы с 3,5-диметоксибензойной кислотой.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 124051400022-7).*