

*Ракова К. С., Гавриленко Е. В.*

**СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ  
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ: КВЕРЦИТИН,  
ЭПИГАЛЛОКАТЕХИН-3-ГАЛЛАТ, РЕСВЕРАТРОЛ,  
БЕТА-КАРОТИН, ЛИКОПИН, АСТАКСАНТИН**

*Научный руководитель: канд. хим. наук, доц. Шахаб С. Н.*

*Кафедра экологической химии и биохимии*

*«Международный государственный экологический институт имени А.Д. Сахарова» БГУ,  
г. Минск*

**Актуальность.** Химические соединения, обладающие антиоксидантными свойствами, находят широкое применение в медицине в качестве лекарственных препаратов, корректирующих интенсивность свободнорадикального окисления при различных заболеваниях, а также в качестве биологически активных добавок к пище, таких как витамины, минеральные вещества и др.

На сегодняшний день учёным известно порядка 3 000 антиоксидантов, число таких соединений ежегодно растёт. Наиболее часто в повседневной жизни население принимает в качестве биологической добавки не ферментативные антиоксиданты – нутриенты (витамины, каротиноиды, биофлавоноиды и минеральные вещества). Фармацевтический рынок способен предложить потребителю широчайший выбор биологически активных веществ различных групп и остановиться на выборе препарата бывает затруднительно. Оценка антиоксидантных свойств веществ с помощью компьютерного моделирования, позволяет без дополнительных затрат на лабораторные исследования определить интенсивность антиоксидантной активности, полученные результаты являться эффективным критерием выбора биологически активных веществ на рынке.

**Цель:** оценить антиоксидантные свойства наиболее популярных неферментативных антиоксидантов: кверцитин, эпигаллокатехин-3-галлат, ресвератрол, бета-каротин, ликопин, астаксантин.

**Материалы и методы.** Исследование проводилось с помощью пакета программного обеспечения ChemDraw Ultra 12.0 (ChemDraw и Chem3D). Для построения химических соединений использовалась открытая база данных химических соединений PubChem (National Institutes of Health, USA). Обработка данных проводилась при использовании пакета MS Excel.

**Результаты и их обсуждение.** Расчет значения энергии ширины запрещенной зоны проводился по формуле  $E_{\text{gap}} = |E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}|$ , где  $E_{\text{LUMO}}$  - энергия низшей свободной молекулярной орбитали;  $E_{\text{HOMO}}$  - энергия высшей занятой молекулярной орбитали.

Анализ проведенных расчетов показал, что наименьшей шириной запрещенной зоны характеризовалось соединение Астаксантин. В целом, исследуемые вещества из группы каротиноидов (Астаксантин, Бета-каротин и Ликопина) занимают три первых ранговых места по своим антиоксидантным свойствам.

Энергия  $E_{\text{gap}}$ , исследуемых соединений из группы биофлавоноидов (Кверцитин, Эпигаллокатехин-3-галлат, Ресвератрол), значительно больше, чем у исследуемых каротиноидов. Данные соединения обладают меньшими антиоксидантными свойствами. Самое низкоэффективное вещество из группы исследуемых - Ресвератрол – обладающий самой большой  $E_{\text{gap}}$ .

**Выводы.** Наиболее активными антиоксидантными свойствами среди группы исследуемых препаратов обладает соединение Астаксантина. Среди всех трех веществ (Астаксантин, Бета-каротин и Ликопин) из группы каротиноидов обнаружена наиболее высокая антиоксидантная активность.