ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/455

ИЗМЕНЕНИЕ ЭНЕРГИИ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ ДИСАХАРИДОВ ИЗ СОСТАВА ПРИРОДНЫХ ПОЛИФЕНОЛЬНЫХ ГЛИКОЗИДОВ.

Мамылов С.Г., Ломовский О.И.

*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия**mamylov@solid.nsc.ru*

Реакции сложных органических соединений фенольной и углеводной природы привлекают внимание исследователей и практиков. Гуминовые кислоты угля и торфа обладают широчайшим кругом применений. Основными компонентами гуминовых кислот являются полифенольная, полисахаридная и липидная составляющие. Многие биологически активные антиоксиданты растительного происхождения класса флавоноидов представляют собой гликозиды – соединения полифенолов с сахарами.

С точки зрения изменения энергии системы в зависимости от состава и строения гликозида рассматривалась возможность химического взаимодействия полифенола кверцетина, моносахаридов глюкозы и рамнозы. Показано, что образование одних стереохимических изомеров энергетически более выгодно, нежели других. В качестве примера можно привести изомер «кверцетин-О3–бета-D-глюкопиранозид», для которого изменение энергии при образовании оказывается отрицательной величиной. Такое значение может свидетельствовать о возможности самопроизвольного протекания реакции гликозилирования. Изомер существует в природе и известен как изокверцетрин.

Сахариды в природе встречаются в форме как моносахаридов, так и разнообразных ди- (сахароза), олиго- и полисахаридов (например, в торфе). Для построения гликозидов полифенолов более высокого порядка необходимо рассмотреть возможности образования собственно дисахаридов с энергетической точки зрения.

Цель настоящей работы – модельное исследование потенциальной энергии системы дисахарида, состоящей из молекул D-глюкопиранозы и L-рамнопиранозы. Выбор моносахаридов обусловлен тем, что известен природный дисахарид рутиноза, получаемый только гидролизом природного полифенольного гликозида рутина.

Программное обеспечение – молекулярный редактор Ghemical, после геометрической оптимизации молекулы методами молекулярной механики рассчитывается потенциальная энергия системы. Более вероятное состояние имеет более низкое значение энергии.

Углеводы - альфа- и бета- аномеры D-глюкопиранозы в конформациях «кресло» $4c_1$ и L-рамнопиранозы «кресло» $1c_4$, соответственно. Брутто-формулы глюкопиранозы и рамнопиранозы $C_6H_{12}O_6$ и $C_6H_{12}O_5$, молярные массы – 180 и 164.

В таком случае изменение энергии системы при образовании различных изомеров дисахарида можно сопоставить с существованием известного соединения. Рассматривались группы соединений $aXg-aYr$, $aXg-bYr$, $bXg-aYr$, $bXg-bYr$, символы g и r означают глюкозу и рамнозу, а и b относятся к альфа- и бета- аномерам углеводов, X и Y показывают места (сайты) соединения мономеров углеводов.

Результаты моделирования показывают, что самопроизвольное ($\Delta E < 0$) протекание реакции при образовании дисахаридов из глюкозы и рамнозы маловероятно. Соединение $b6g-a1r$, которое можно рассматривать как рутинозу, обладает одним из

полученных низких, но положительных, $\Delta E > 0$, значений. Последнее согласуется с положением, почему дисахарид рутинозу получают не синтезом из моносахаридов, а гидролизом сложного гликозида рутина.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-13-10200).