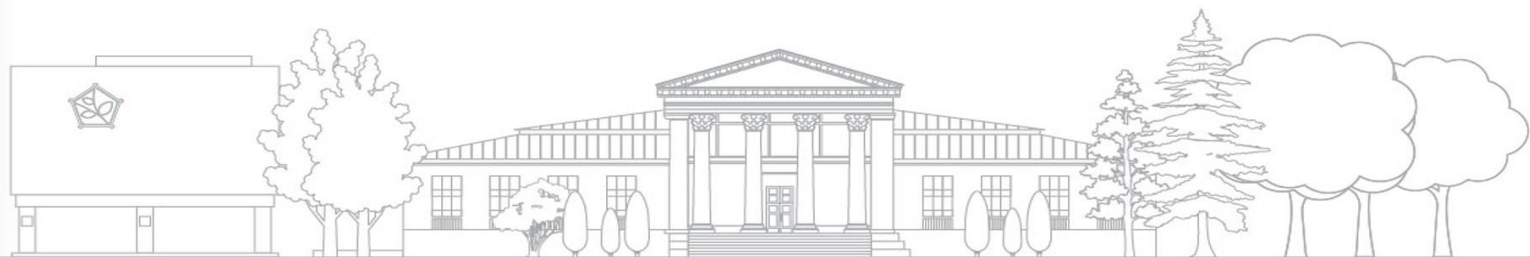


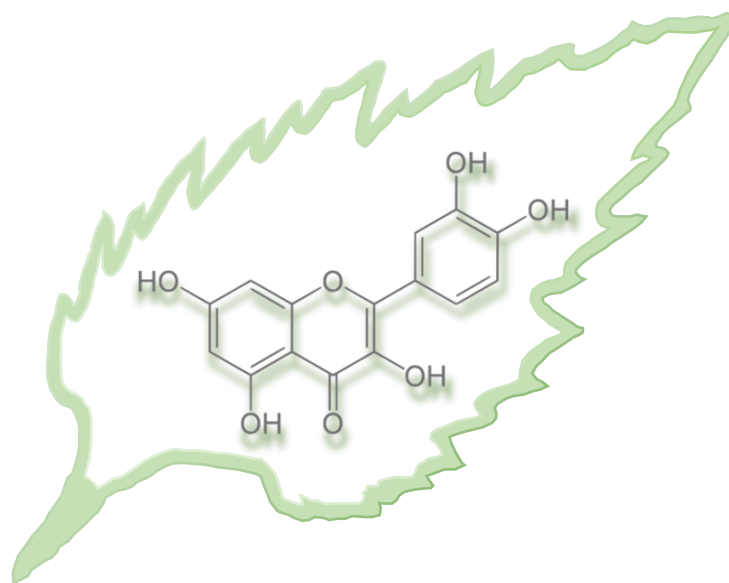
**ИНСТИТУТ ФИЗИОЛОГИИ РАСТЕНИЙ
им. К.А.ТИМИРЯЗЕВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**



МАТЕРИАЛЫ

XI МЕЖДУНАРОДНОГО СИМПОЗИУМА ФЕНОЛЬНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ: ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ

Москва, 11 – 15 апреля 2022 года



Москва, 2022 г.

УДК 581.198(063)
ББК 28.572.517я431
Ф42

Издается по решению
Ученого совета ИФР РАН

Редакционная коллегия:
Д.А. Лось, Н.В. Загоскина, В.А. Куркин, П.В. Лапшин

Ф42 Фенольные соединения: фундаментальные и прикладные аспекты:
материалы докладов XI международного симпозиума (Москва, 11–15
апреля 2022 г). М.: ИФР РАН, 2022. – М.: Издательство «Перо», 2022.
– 250 с. – 3,6 Мбайт. [Электронное издание]

ISBN 978-5-00204-153-4

В сборнике представлены материалы докладов XI международного симпозиума «Фенольные соединения: фундаментальные и прикладные аспекты» (Москва, 11–15 апреля 2022 г.). Отражены основные исследования по изучению структуры фенольных соединений, их физико-химических свойств, активности и распространения в растениях. Рассмотрены различные аспекты изучения полифенолов, регуляции их образования и распределения в клетках и тканях растений. Приводятся данные об их роли в растительной экофизиологии (биотические и абиотические стрессы, патогенез, устойчивость, сигналинг). Сообщается об участии генов, регулирующих направленность биосинтеза определенных классов фенольных соединений. Значительное внимание уделено инновационным направлениям использования фенольных соединений, в том числе в фармакологии и медицине.

Издание представляет интерес для широкого круга специалистов по физико-химической биологии, химии, физиологии и биохимии растений, молекулярной биологии, биотехнологии, фармакогнозии, агротехнологии и защиты растений.

Материалы публикуются в авторской редакции с согласия авторов.

УДК 581.198(063)
ББК 28.572.517я431

ISBN 978-5-00204-153-4

© Коллектив авторов, 2022
© Институт физиологии растений
им. К.А. Тимирязева РАН, 2022

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОТОЛИТИЧЕСКИХ РАВНОВЕСИЙ ПРИРОДНЫХ ФЕНОЛОВ

Вусович О.В.¹, Чайковская О.Н.^{1,2}, Андреева К.В.¹

¹Томский государственный университет, Томск

²Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, ka1314049@gmail.com

Ванилин – одно из самых известных душистых веществ, а изованилин пахнет подобно фенолу (карболке), да и то при повышенной температуре. Ванилин и ванилиновая кислота содержатся в эфирных маслах многих растений, особенно богаты им плоды ванили. Ванилин устойчив к окислению, не вступает в реакцию Канницарро и другие реакции, характерные для ароматических альдегидов, обладает хорошей растворимостью в воде, этаноле, эфире, серной кислоте и других растворителях, применяется как ароматизатор в пищевой промышленности и душистое вещество в парфюмерии, для придания блеска покрытиям в гальванотехнике и для синтеза некоторых лекарственных средств, например, фтивазида. При рассмотрении в качестве объектов исследования ванилина, изованилина и ванилиновой кислоты необходимо учитывать присутствие в их строении заместителей в *мета*- и *пара*- положениях (метокси- и гидроксильная группы). ОН-группа в молекулах рассматриваемых бензальдегидов сообщает им кислотные свойства. Причем способность к ионизации в растворе этих соединений определяется взаимным влиянием хромофорных групп на распределение электронной плотности в молекуле.

При растворении наблюдается заметное изменение электронных спектров поглощения и флуоресценции соединений по сравнению со спектрами этих веществ в газовой фазе. В этом случае молекулы находятся под действием не только световой волны, но и поля межмолекулярных сил, окружающих частиц среды. Целью данного исследования является выявление закономерностей изменения протонодонорной и протоноакцепторной активности ванилина, изованилина и ванилиновой кислоты в зависимости от положения карбоксильной группы методами электронной спектроскопии и квантовой химии. Результаты могут использоваться при синтезе новых производных бензойной кислоты с заданными фармакологическими и терапевтическими свойствами. Очевидна и биохимическая значимость протолитических равновесий, особенно при изучении транспортных функций в биологических системах. Данные соединения имеют в своей структуре несколько активных центров: фенольное кольцо, карбонильная группа, карбоксильная группа и метоксигруппа. Изменение перераспределения электронной плотности на этих фрагментах при возбуждении изучено для нейтральных и ионных форм в основном и возбужденных состояниях. Атом карбонильного кислорода в анионных формах также, как и в нейтральных, имеет довольно значительный минимум электростатического потенциала.

Показано, что протоноакцепторная способность изомеров ванилина и изованилина примерно одинакова. В основном состоянии нейтральной формы изованилина самым электроотрицательным центром является метокси-группа. Установлено, что в основном и первом возбужденном электронных состояниях ванилин и изованилин существует в трех, а ванилиновая кислота - четырех протолитических формах. Ванилин обладает более кислотными и основными свойствами, по сравнению с изованилином. В нейтральных формах изученных соединений самым протоноакцепторным центром является атом карбонильного кислорода. В анионных формах ванилина и изованилина за счет того, что происходит отрыв протона в гидроксигруппе, образуется два протоноакцепторных центра: атомы кислорода карбонильной и О⁻ групп. Вероятность подхода протона из среды к каждой из этих групп примерно одинакова.

Исследование выполнено при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030).