

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СУПЕРОКСИД – УТИЛИЗИРУЮЩЕЙ АКТИВНОСТИ НОВЫХ ГИДРОКСИПРОИЗВОДНЫХ ХАЛКОНОВ – ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ КРИОПРОТЕКТОРОВ

Коляда М. Н.<sup>1</sup>, Пашенко К. П.<sup>2</sup>, Великородов А. В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФГБУ Федеральный исследовательский центр Южный научный центр  
Российской академии наук, Ростов-на-Дону, Россия

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО «Астраханский государственный технический университет»,  
Астрахань, Россия

<sup>3</sup>ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет»,  
Астрахань, Россия

[mnkolyada@mail.ru](mailto:mnkolyada@mail.ru)

Важную роль в интенсификации окислительных процессов при криоконсервации репродуктивных клеток рыб играет продукт одноэлектронного восстановления кислорода - супероксид анион-радикал ( $O_2^{\bullet-}$ ). Следовательно, антиоксиданты (АО), вводимые в базовую криозащитную среду для поддержания физиологического уровня реактивных форм кислорода (РФК) при криоконсервации, должны обладать  $O_2^{\bullet-}$  – утилизирующей способностью. В данном исследовании, на примере реакции с  $O_2^{\bullet-}$ , проведено квантово-химическое моделирование антиоксидантной активности новых карбаматных производных фенола – соединений **1** (метил-N-(4-((E)-3-[3,5-ди(трет-бутил)-4-гидроксифенил]2-пропеноил)фенил)карбамат) и **2** (метил-N-[4-(3,5-диоксо-2,5-дигидро-3H-имидазо-[5,1-a]изоиндол-1-ил)-3-гидроксифенил]карбамат), а также известного фенольного АО прямого действия ионола (**3**) в качестве соединения сравнения. Соединение **1** содержит пространственно-затрудненный фенольный гидроксил, а также фрагмент халкона. В гетероциклическом соединении **2** фенольный фрагмент непосредственно связан с карбаматным фрагментом.

Методом функционала плотности с использованием программы Gaussian 09 были рассчитаны энергетические эффекты ( $\Delta E$ ) отрыва водорода от ОН-групп соединений как разность полных энергий конечных и начальных структур. Квантово-химический расчет показал, что значение  $\Delta E$  для реакции соединения **1** с  $O_2^{\bullet-}$  составляет 66,2 кДж/моль, соединения **2** – 71,2 кДж/моль, ионола – 68,5 кДж/моль. Таким образом, в данной работе показано, что в рамках используемого модельного подхода способность новых гидроксизамещенных арилкарбаматов к утилизации  $O_2^{\bullet-}$  сравнима с ионолом и превосходит активность ранее исследованных соединений с халконовым и кумариновым фрагментами (Коляда М. Н., Пашенко К. П., Минина Ю.Д., 2021).

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-16-00095.*