

Комплекс рутина с фосфатидилхолином

© Сетченков Михаил Сергеевич, Усманова Светлана Ильдаровна,
Афанасьева Юлия Геннадьевна и Насибуллин Руслан Сагитович*⁺

Кафедра медицинской физики. Башкирский государственный медицинский университет.

Ул. Ленина, 3. г. Уфа, 450000. Республика Башкортостан. Россия.

Тел.: (347) 273-61-83. E-mail: med-fis@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: рутин, клеточный фосфатидилхолин, квантово-химические расчеты, методы ^{31}P и ^{13}C ЯМР спектроскопии.

Аннотация

Представлены результаты исследований взаимодействия молекулы рутина (5,7,3',4'-тетраокси-флавоон-3-рутинозид) и клеточного фосфатидилхолина (лецитин). Полуэмпирическим методом квантовой химии AM1, методом функционала плотности (DFT) и ЯМР спектроскопией на ядрах ^{31}P и ^{13}C исследованы основные структурные параметры и электронное строение рутина и лецитина, их комплекса, а также энергии комплексообразования.