

Квантово-химическое изучение взаимодействия оксида азота(II) с пространственно-затрудненными фенолами

© Воробьев⁺ Степан Владимирович, Андреев Тимофей Алексеевич,
Воронин Антон Юрьевич, Кошелев* Владимир Николаевич

Кафедра органической химии и химии нефти. РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина.
Ленинский пр-т, 65. г. Москва, 119991. Москва. Россия. Тел.: +7 (916) 641-72-16.

E-mail: vorstepan@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пространственно-затрудненные фенолы, оксид азота(II), антиокислительная активность, исследование механизма реакции, теория функционала плотности.

Аннотация

Избыточное образование в организме оксида азота(II), которое наблюдается при хронических воспалительных процессах, может приводить к повреждению здоровых тканей и органов, способствуя образованию активных форм азота и вызывая нитрозирующий стресс. Одним из способов борьбы с этим патологическим процессом является применение антиоксидантов, способных взаимодействовать с молекулой NO, в частности, фенолов. Несмотря на наличие в литературе данных об успешном их применении, механизм антиокислительной активности подробно не изучался. В данной работе с целью оценки эффективности пространственно-затрудненных фенолов для борьбы с нитрозирующим стрессом было рассмотрено взаимодействие оксида азота(II) с двумя соединениями – 2,4,6-три-*трет*-бутилфенолом и 2,6-ди-*трет*-бутил-4-метилфенолом (ионол, ВНТ) с помощью методов квантовой химии. Расчеты были выполнены в DFT-функционале uB3LYP и базисе 6-31+G(d,p). Для учета сольватационных эффектов (растворитель – циклогексан) использовался метод SMD. В отсутствие кислорода реакция протекает в две стадии. На первой происходит гомолитический разрыв связи кислород-водород в гидроксильной группе фенола с образованием феноксильного радикала и молекулы нитроксила HNO. На второй стадии к образовавшемуся радикалу присоединяется вторая молекула NO, что приводит к соответствующим C-нитрозопроизводным. Для обоих фенолов данный процесс является эндергоническим, требуя около 30 ккал/моль энергии. Протекание реакции возможно благодаря сопряжению с энергетически выгодным процессом распада образующейся молекулы нитроксила. В случае три-*трет*-бутилфенола образуются оба возможных продукта присоединения в *орто*- и *пара*-положения относительно гидроксильной группы, в то время как ионол даёт только *пара*-продукт. Сравнивая два реагента, можно заключить, что ионол более предпочтителен в качестве субстрата для реакции с NO. Энергия Гиббса активации на первой стадии для него меньше 0.8 ккал/моль, а на второй стадии – на 3.7 ккал/моль.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Воробьев С.В., Андреев Т.А., Воронин А.Ю., Кошелев В.Н. Квантово-химическое изучение взаимодействия оксида азота(II) с пространственно-затрудненными фенолами. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.80. №12. С.13-19. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-12-13

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Воробьев С.В., Андреев Т.А., Воронин А.Ю., Кошелев В.Н. Квантово-химическое изучение взаимодействия оксида азота(II) с пространственно-затрудненными фенолами. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.9. №4. Id.17. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-12-13/ROI-jbc-RA/24-9-4-17

The output for citing the English online version of the article:

Stepan V. Vorobyev, Timofey A. Andreev, Anton Yu. Voronin, Vladimir N. Koshelev. Quantum-chemical study of interaction of nitric oxide with sterically hindered phenols. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.9. No.4. Id.17. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-80-12-13/ROI-jbc-A/24-9-4-17