

ЭНЕРГЕТИКА ОКИСЛЕНИЯ ГИДРОКСИРАДИКАЛОМ ГАЛЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ГАЛЛАМИДА

Кондрашов Б.А.¹, Першин А.А.^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королева

²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН

Влияние продуктов сгорания топлива на живые организмы представляет собой важную проблему при разработке экологически безопасных двигателей внутреннего и внешнего сгорания. Среди продуктов сгорания наибольшую опасность представляют свободные радикалы, включая гидроксирадикалы, из-за их высокой реакционной способности.

В данном исследовании рассмотрено окисление гидроксирадикалами галловой кислоты и галламида — соединений, содержащихся в ряде лекарственных растений. С использованием методов квантовой химии в программном пакете ORCA были рассчитаны переходные состояния и энергетические профили реакций окисления.

Определены механизмы окисления галловой кислоты и галламида гидроксирадикалом в газовой фазе и в различных растворителях (вода, этанол). В газовой фазе энергия активации составляет около 50 ккал/моль, тогда как в растворителях реакция протекает практически безбарьерно. Выбор растворителя существенно влияет на энергетические параметры и кинетику реакций.

Полученные результаты углубляют понимание механизмов окисления и способствуют разработке эффективных методов синтеза и катализа для медицинских препаратов. Кроме того, они имеют значение для оценки воздействия гидроксирадикалов на биохимические процессы в живых организмах и экологические последствия продуктов сгорания.

Сведения об авторах

Першин Андрей Александрович к.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории физико-химической кинетики СФ ФИАН, старший преподаватель кафедры физики Самарского университета

Кондрашов Богдан Алексеевич – бакалавр физического факультета Самарского университета