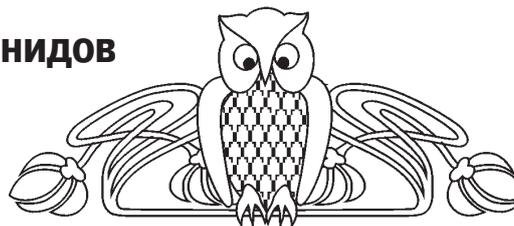




УДК (547.1'123+544.431.15+544.433.3):(543.422.3+539.193/194+541.6)

Выяснение возможности взаимодействия органических селенидов и соли дигидроселенохромилия с дифенилпикрилгидразилом

А. Н. Панкратов, О. М. Цивилева, О. А. Цымбал, Я. Б. Древки, Р. С. Тумский, А. В. Маракаева



Панкратов Алексей Николаевич, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры аналитической химии и химической экологии Института химии, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, PankratovAN@info.sgu.ru

Цивилева Ольга Михайловна, доктор биологических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории микробиологии, Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН, Саратов, tsivileva@ibppm.ru

Цымбал Олег Александрович, инженер-технолог отдела главного технолога, ООО «СЭПО-ЗЭМ» Саратовское электроагрегатное производственное объединение, olegtsymbal1990@yandex.ru

Древки Ярослав Борисович, кандидат химических наук, доцент кафедры «Микробиология, биотехнология и химия», Саратовский государственный аграрный университет имени Н. И. Вавилова, drevko@list.ru

Тумский Роман Сергеевич, аспирант кафедры органической и биоорганической химии Института химии, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, roma_ronaldinho@rambler.ru

Маракаева Анастасия Вячеславовна, аспирант кафедры аналитической химии и химической экологии Института химии, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, marakaeva_anastasiya@mail.ru

Высшие грибы – макробазидиомицеты имеют важное значение как продукты питания и биологические объекты для установления закономерностей функционирования, развития живых систем, их отклика на действие эффекторов различной природы. Недостаточно высокая активность антиоксидантной системы живых организмов, не позволяющая преодолеть негативные последствия окислительного стресса (избыточный уровень свободных радикалов в клетках) – причина старения и отмирания организмов. Ярко выраженными антиоксидантными свойствами обладают соединения селена, который является также жизненно важным микроэлементом с уникальными биологическими функциями. Селенсодержащие соединения обладают широким спектром биологического действия. Одним из показателей антиоксидантного действия служит антирадикальная активность, определяемая по реакции с участием стабильного свободного радикала дифенилпикрилгидразила (ДФПГ) $(C_6H_5)_2N-N^+-C_6H_2(NO_2)_3-2,4,6$. Другим важным индексом антиоксидантной активности является уровень пероксидного окисления липидов

(ПОЛ), оцениваемый по реакции с тиобарбитуровой кислотой (ТБК). Ввиду токсичности неорганических соединений селена в качестве антиоксидантных и микроэлементных добавок при культивировании базидиомицетов перспективны селенорганические соединения. Поэтому следует осуществить контрольные реакции селенорганических соединений с ДФПГ и ТБК. Цель настоящей работы – выяснение возможности взаимодействия трёх органических селенидов и соли дигидроселенохромилия с ДФПГ и ТБК. Типовые методики определения антирадикальной активности и уровня ПОЛ адаптированы к цели исследования. Спектрофотометрическим методом с привлечением квантовохимических расчётов на уровне теории B3LYP/6-311++G(d,p) и NBO-анализа изучено взаимодействие ряда селенорганических и модельных соединений с ДФПГ. Показано, что диацетофенонилселенид $C_6H_5COCH_2SeCH_2COC_6H_5$ почти не ингибирует ДФПГ. Уровень ингибирования наиболее высок в случае 2-(4-бромфенил)-4-фенил-7,8-бензо-5,6-дигидро-4H-селенохромена и особенно перхлората 2,4-дифенил-7,8-бензо-5,6-дигидроселенохромилия. Для соли значительная степень ингибирования может быть связана с активацией метиленовых групп в элементоорганическом катионе за счёт приобретения гетерокольцом положительного заряда. В смеси селенорганического (диацетофенонилселенид, дигидроселенохромены, соль дигидроселенохромилия) или модельного соединения с ТБК не образуются продукты, имеющие полосы поглощения в видимой области спектра.

Ключевые слова: селенорганические соединения, диацетофенонилселенид, дигидроселенохромены, соли дигидроселенохромилия, ДФПГ, тиобарбитуровая кислота, ингибирование, спектрофотометрия, квантовохимические расчёты, теория функционала плотности, B3LYP, NBO-анализ.

DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9775-2019-19-1-39-49>

Высшие грибы – макробазидиомицеты имеют важное значение как продукты питания и биологические объекты для установления закономерностей функционирования, развития живых систем, их отклика на действие эффекторов различной природы.

Недостаточно высокая активность антиоксидантной системы живых организмов, не позволяющая преодолеть негативные последствия окислительного стресса (избыточный уровень свободных радикалов в клетках) – причина старения и отмирания организмов [1–3].

Для повышения устойчивости культур высших грибов к окислительному стрессу, для обеспечения их редокс-статуса, адекватного в



плане клеточной дифференциации и перехода к генеративной стадии, используют антиоксиданты.

Ярко выраженными антиоксидантными свойствами обладают соединения селена, который является также жизненно важным микроэлементом с уникальными биологическими функциями. Селеносодержащие соединения обладают широким спектром биологического действия (см. библиографию работы [4]).

Одним из показателей антиоксидантного действия служит антирадикальная активность, определяемая по реакции [5] с участием стабильного свободного радикала 1,1-дифенил-2-пикрилгидразила (2,2-дифенил-1-пикрилгидразил, N,N-дифенил-N'-пикрилгидразил,ДФПГ) $(C_6H_5)_2N-N'-C_6H_2(NO_2)_3-2,4,6$ ([6–9] и др.).

Другим важным индексом антиоксидантной активности является уровень пероксидного окисления липидов (ПОЛ) [10–18], оцениваемый по реакции [5] с тиобарбитуровой кислотой (ТБК).

Ввиду токсичности неорганических соединений селена в качестве антиоксидантных и микроэлементных добавок при культивировании базидиомицетов перспективны селенорганические соединения.

При биотестировании названных соединений понадобится учёт возможного взаимодействия самих добавок с ДФПГ и ТБК. Кроме того, вероятно присутствующие в исходных реактивах и/или возникающие при лабораторной процедуре синтеза Se-органических веществ микропримеси могут повлиять на чистоту антиоксидантных тестов.

Поэтому следует осуществить контрольные («холостые») реакции селенорганических соединений с ДФПГ и ТБК.

При параллельном проведении биотестовых и контрольных реакций с ДФПГ и ТБК влияние растворителя и микропримесей релятивизируется, поэтому и в нашей работе необходимость учёта их возможного взаимодействия с селенорганическими веществами, ДФПГ и ТБК отсутствует. Кроме того, методики [5] определения антирадикальной активности и уровня ПОЛ общеприняты, доказали свою надёжность и не отягощены взаимодействием ДФПГ и ТБК с растворителем (этанолом).

Цель настоящей работы – выяснение возможности взаимодействия трёх органических селенидов и соли дигидроселенохромилия с дифенилпикрилгидразилом и тиобарбитуровой кислотой.

Материалы и методы

1. Объекты и методы экспериментального исследования

Объектами исследования (рис. 1) служили, во-первых, следующие органические соединения селена: 1,5-дифенилселенопентандион-1,5 (диацетофенонилселенид, бис(бензоилметил)селенид, препарат ДАФС-25) $C_6H_5COCH_2SeCH_2COC_6H_5$ (1), 2,4-дифенил-7,8-бензо-5,6-дигидро-4H-селенохромен (2), 2-(4-бромфенил)-4-фенил-7,8-бензо-5,6-дигидро-4H-селенохромен (3) и перхлорат 2,4-дифенил-7,8-бензо-5,6-дигидроселенохромилия (4) [19–24].

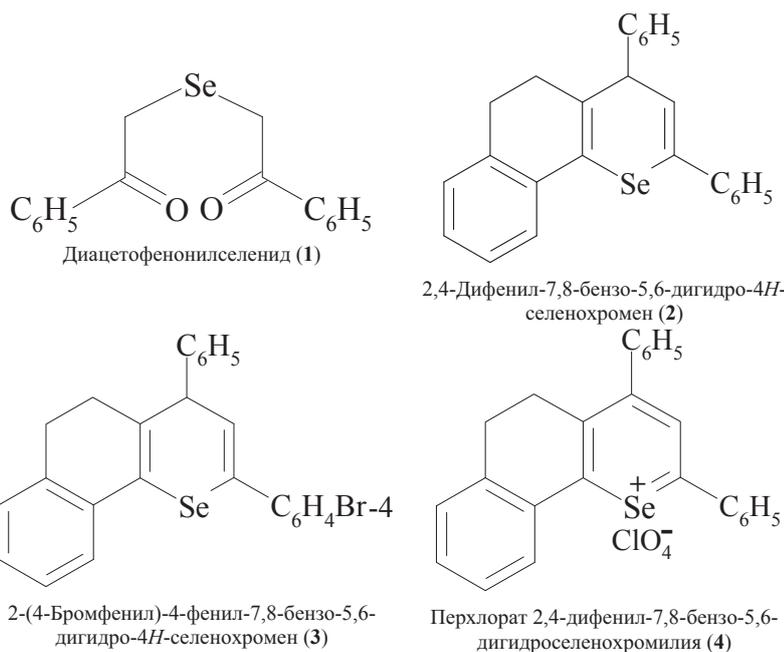


Рис. 1. Селенорганические соединения



Другую группу объектов исследования составляли модельные соединения: циклогексан C_6H_{12} , бензол C_6H_6 , этилбензол $C_6H_5CH_2CH_3$, ацетофенон $C_6H_5COCH_3$, бромбензол C_6H_5Br .

Для изучения взаимодействия химических соединений с ДФПГ и ТБК нами адаптированы методики, изложенные в книге [5]. Поскольку реализованные в нашей работе методики несколько отличаются от стандартных [5], мы сочли необходимым привести их в статье по сути как фрагмент обсуждения результатов, попавший в силу специфики своего содержания в раздел «Материалы и методы».

Концентрация селенорганических соединений **1-4** и модельных веществ была той же, что и в культуральных жидкостях при выращивании культур высших грибов, а именно $1.00 \cdot 10^{-4}$ моль/л. По точной навеске готовят $1.00 \cdot 10^{-2}$ М раствор вещества **1** в 96 об. %-ном водном этаноле CH_3CH_2OH . Соединения **2-4** растворяют с концентрацией $1.00 \cdot 10^{-2}$ моль/л в смеси 96 об. %-ный этанол – 2-пирролидон (рис. 2) – диметилсульфоксид $(CH_3)_2S \rightarrow O$ в объёмном соотношении 3 : 3 : 1. Исходные $1.00 \cdot 10^{-2}$ М растворы веществ **1-4** разбавляют 80 об. %-ным этанолом до концентрации $1.00 \cdot 10^{-4}$ моль/л. $1.00 \cdot 10^{-2}$ М растворы жидких модельных соединений приготавливают путём растворения рассчитанных объёмов веществ в 80 об. %-ном этаноле; этим же растворителем производят разбавление до рабочей концентрации $1.00 \cdot 10^{-4}$ моль/л.

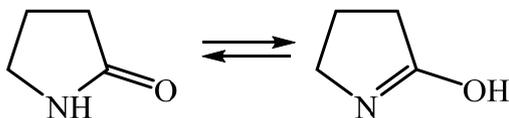


Рис. 2. 2-Пирролидон

2. Изучение взаимодействия селенорганических и модельных соединений с дифенилпикрилгидразилом (рис. 3)

Используют 0.1 мМ раствор ДФПГ в 80 об. %-ном водном этаноле. Массу ДФПГ для приготовления раствора вычисляют по формуле: $m = McV \cdot 10^{-6}$, где m – масса ДФПГ, г; M – молярная масса ДФПГ, равная 394.33 г/моль; c – концентрация раствора ДФПГ (0.1 ммоль/л); V – необходимый объём раствора, мл. На 25 мл раствора берут навеску 0.0010 г ДФПГ. Для ускорения и обеспечения полноты растворения вещества используют ультразвук (частота акустических колебаний 30–40 МГц, время 10–15 мин, температура 27 °С), генерируемый в ультразвуковой ванне «Сапфир» (Россия). Раствор хранят не более двух суток.

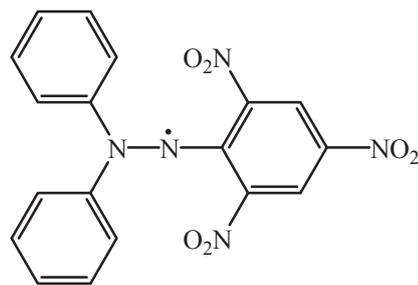


Рис. 3. Дифенилпикрилгидразил (ДФПГ)

Строят градуировочную характеристику по тролоксу (6-гидрокси-2,5,7,8-тетраметилхроман-2-карбоновая кислота) (рис. 4) в координатах процент ингибирования – количество вещества. Для этого растворяют 3 мг тролокса в 2.4 мл 80 об. %-ного этанола. Раствор нестойкий, хранится не более двух суток. Для каждого образца выполняют три параллельных опыта. В контрольную пробирку (контрольный опыт) вносят только 2 мл этанола. Инициирование реакции производят путём добавления в реакционную смесь по 2 мл раствора ДФПГ. Пробирки хорошо встряхивают и оставляют на 30 мин в темноте. По истечении указанного времени регистрируют электронные абсорбционные спектры. Берут значения оптической плотности растворов при одной длине волны во всех опытах ($\lambda = 517$ нм).

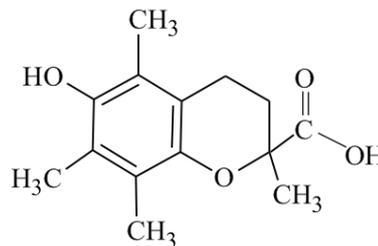


Рис. 4. Тролокс

Для расчёта процента ингибирования используют формулу

$$\text{процент ингибирования} = \frac{A_0 - A_x}{A_0} \cdot 100,$$

где A_0 – оптическая плотность в отсутствие антиоксидантов (контроль); A_x – оптическая плотность исследуемого раствора. По градуировочному графику находят количество вещества, вступившего в реакцию с ДФПГ.

3. Изучение взаимодействия селенорганических соединений с тиобарбитуровой кислотой (рис. 5)

Используют 0.25 масс. %-ный водный раствор ТБК. К 2 мл образца приливают 1 мл 0.25 %-ного водного раствора ТБК и помещают пробы на



10 минут в кипящую водяную баню. После развития розовой окраски реакционную смесь охлаждают и центрифугируют в течение 10 минут. В качестве контроля используют смесь этанола и 0.25 %-ного водного раствора ТБК. Оптическую плотность измеряют при длине волны $\lambda = 532$ нм.

Для регистрации электронных спектров поглощения при исследовании реакций с участием как ДФПГ, так и ТБК применяют спектрофотометр Shimadzu UV-1800 (Япония).

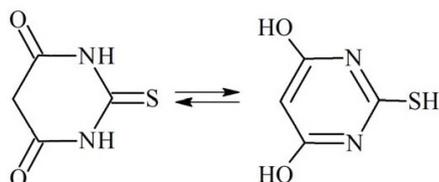


Рис. 5. Тиобарбитуровая кислота (ТБК)

4. Методика квантовохимического исследования

Исследование осуществлено методом теории функционала плотности (*Density Functional Theory*, DFT) [25–28] в варианте B3LYP [29–31] с базисным набором 6-311++G(d,p) [32, 33] с привлечением анализа натуральных связевых

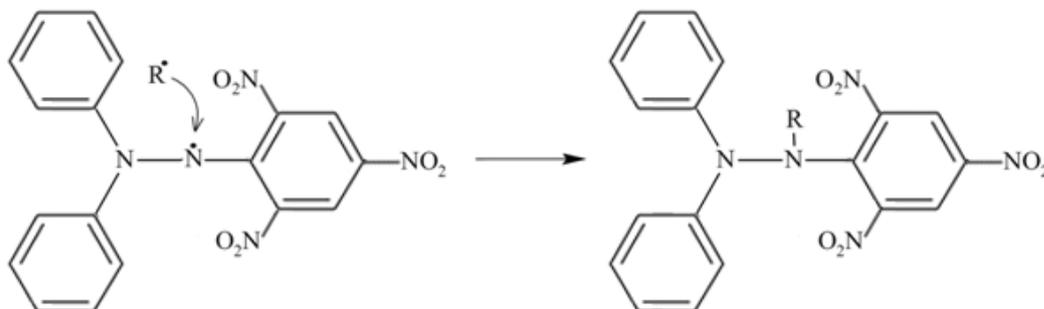


Рис. 6. Схема взаимодействия радикалов R^\bullet с ДФПГ

Чтобы опосредованно оценить возможность участия тех или иных связей С–Н или С–Вг рассматриваемых селенорганических молекулярных систем в реакции с ДФПГ, нами наряду с веществами 1–4, в названной реакции были изучены модельные соединения: циклогексан (неактивированная метиленовая группа CH_2), бензол (связь С–Н в ароматическом кольце), этилбензол (CH_2 -звено по соседству с ароматической системой), ацетофенон (связи С–Н в α -положении к карбонильной группе $\text{C}=\text{O}$), бромбензол (связь $\text{C}_{\text{Ar}}-\text{Br}$).

Результаты исследования реакции ингибирования ДФПГ показаны в таблице и на рис. 7–10. В таблице границы доверительных интервалов для значений количества вещества n приведены при числе измерений (объёме выборки) 3, числе степеней свободы 2, уровне доверительной вероятности 0.95.

орбиталей (*Natural Bond Orbital Analysis*, NBO-анализ) [34–39]. Квантовохимические расчёты проведены с использованием критерия сходимости «tight» [31, 40] по программам пакета Gaussian 03W [41]. NBO-анализ реализован по программе NBO 3.1 [39].

Результаты и их обсуждение

1. Взаимодействие селенорганических и модельных соединений с дифенилпикрилгидразилом

Антирадикальная активность служит мерой антиоксидантного действия веществ. Суть способа определения антирадикальной активности [5] заключается в снижении оптической плотности раствора стабильного свободного радикала ДФПГ ($\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{N}-\text{N}^\bullet-\text{C}_6\text{H}_2(\text{NO}_2)_3$ -2,4,6 в присутствии антиоксидантов вследствие протекания его реакций с радикалами R^\bullet (рис. 6) ([6–9] и др.):

В приведённой на рис. 6 схеме под R^\bullet понимаются радикалы как уже имеющиеся в биологической среде, так и образующиеся в результате отрыва дифенилпикрилгидразилом атома водорода H^\bullet (в особенности подвижного) от молекул компонентов этой среды и введённых антиоксидантов либо других химических эффекторов.

Количество вещества, вступившего в реакцию с ДФПГ (n); мольная доля прореагировавшего вещества (v) для селенорганических (1–4) и модельных соединений

Соединение	n , мкмоль	s_r^*	v
1	1.0 ± 0.2	0.07	0.01
2	14 ± 3	0.08	0.14
3	41 ± 8	0.08	0.41
4	51 ± 6	0.05	0.51
Циклогексан	7 ± 4	0.2	0.07
Бензол	6 ± 2	0.04	0.06
Этилбензол	10 ± 2	0.07	0.10
Ацетофенон	12 ± 4	0.03	0.12
Бромбензол	12 ± 1	0.04	0.12

Примечание. $*s_r$ – относительное стандартное отклонение.

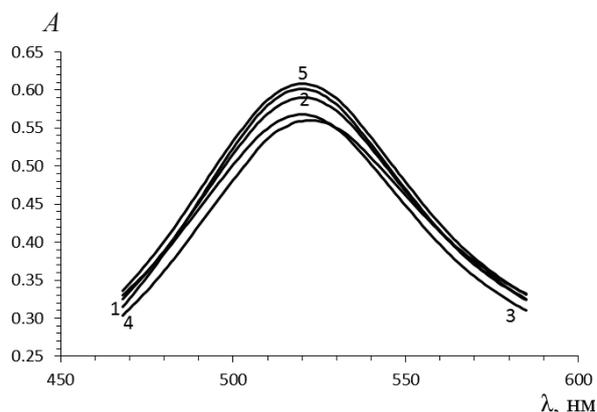


Рис. 7. Спектры поглощения реакционных смесей ингибирования ДФПГ. Нумерация соединений: 1 – 1, 2 – 2, 3 – 3, 4 – 4, 5 – контрольный раствор

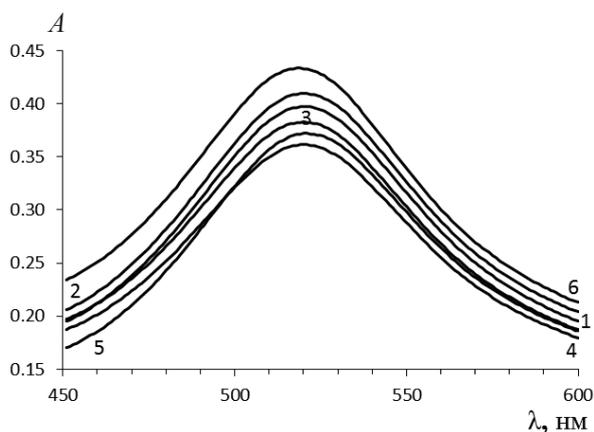


Рис. 8. Спектры поглощения реакционных смесей ингибирования ДФПГ. Нумерация соединений: 1 – циклогексан, 2 – бензол, 3 – этилбензол, 4 – ацетофенон, 5 – бромбензол, 6 – контрольный раствор

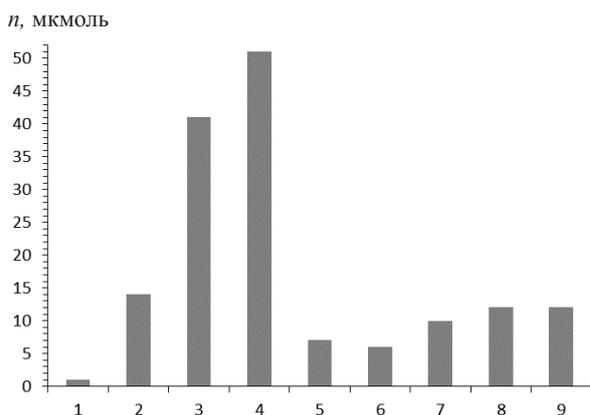


Рис. 9. Диаграмма ингибирования ДФПГ: количество вещества, вступившего в реакцию с ДФПГ (n). Нумерация соединений: 1 – 1, 2 – 2, 3 – 3, 4 – 4, 5 – циклогексан, 6 – бензол, 7 – этилбензол, 8 – ацетофенон, 9 – бромбензол

Под контрольным на рис. 7–10 понимается раствор ДФПГ в отсутствие других веществ (1–4 либо модельных).

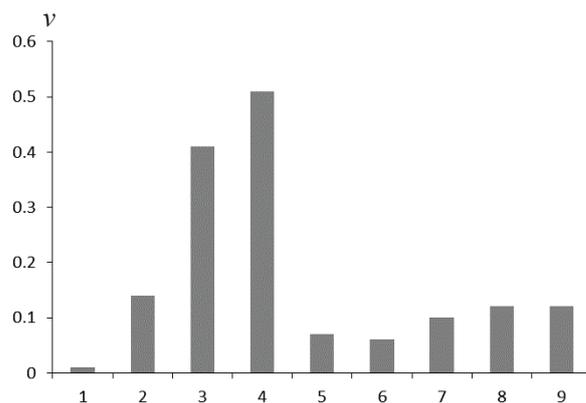


Рис. 10. Диаграмма ингибирования ДФПГ: мольная доля прореагировавшего вещества (ν). Нумерация соединений: 1 – 1, 2 – 2, 3 – 3, 4 – 4, 5 – циклогексан, 6 – бензол, 7 – этилбензол, 8 – ацетофенон, 9 – бромбензол

Широкий в ряде случаев доверительный интервал (см. таблицу) обусловлен «потерей точности при вычитании» в ходе разностных оценок ($A_0 - A_x$).

Модельные вещества, как и соединения 1–4, проявляют эффект ингибирования ДФПГ. При этом степень протекания указанного процесса несколько больше в случае систем с более или менее активированными связями С–Н: для этилбензола и ацетофенона выше, нежели для циклогексана; для бромбензола выше, чем для бензола.

Почти не ингибирует ДФПГ диацетофенонилселенид $C_6H_5COCH_2SeCH_2COC_6H_5$ (1). Степень превращения вещества 1 (см. таблицу) даже ниже, чем в случае ацетофенона и других модельных соединений. Возможным объяснением этому служит экранирование атома азота – центра радикальной атаки в ДФПГ в сочетании со стерической малодоступностью CH_2 -групп в селениде 1.

Ингибирующий эффект вещества 2 весьма близок к таковому для этилбензола, ацетофенона и бромбензола.

Наибольшую степень ингибирования ДФПГ демонстрируют соединения 3 и 4, особенно последнее.

Наиболее высокий уровень ингибирования ДФПГ для соли 4 может быть связан с активацией метиленовых групп CH_2 в катионе 4 за счёт приобретения гетерокольцом положительного заряда. Последнее подтверждается проведёнными нами на уровне теории $V3LYP/6-311++G(d,p)$ квантово-химическими расчётами, показавшими, что сумма значений натурального заряда атомов углерода и селена гетероцикла в системах 2–4 составляет: -0.474 (2), -0.481 (3), 0.300 (изолированный катион 4 без перхлорат-аниона ClO_4^-), 0.415 (соль 4).



Более строгое объяснение результатов сравнительного экспериментального изучения ингибированияДФПГ соединениями **1–4** и модельными веществами может быть осуществлено лишь с привлечением дополнительных методов исследования: ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{81}Br , электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), химически индуцированной динамической поляризации ядер (ХИДПЯ) и др. [42, 43].

2. Взаимодействие селенорганических и модельных соединений с тиобарбитуровой кислотой

Ещё одна величина служит мерой антиоксидантного действия. Это уровень пероксидного окисления липидов, оцениваемый по реакции с ТБК.

Пероксидное окисление липидов (ПОЛ) – их окислительная деградация, происходящая в основном под воздействием свободных радикалов [10–18].

Наши эксперименты как с веществами **1–4**, так и с модельными соединениями (циклогексан, бензол, этилбензол, ацетофенон, бромбензол) привели к отрицательным результатам. Никакие из названных соединений не приводят к образованию окрашенных форм с максимумом поглощения в области $\lambda = 532$ нм, характерного для продуктов взаимодействия ТБК с дикарбонилами (большой частью 1,2- и 1,3-дикарбонильными соединениями) – интермедиатами реакции ПОЛ [5, 18]. Более того, не возникают вообще какие-либо продукты, поглощающие в видимой области спектра.

Заключение

1. Типовые методики определения антирадикальной активности и уровня ПОЛ адаптированы к задаче выяснения возможности взаимодействия органических соединений селена сДФПГ и ТБК.

2. Диацетофенонилселенид почти не ингибируетДФПГ. Уровень ингибирования наиболее высок в случае 2-(4-бромфенил)-4-фенил-7,8-бензо-5,6-дигидро-4Н-селенохромена и особенно перхлората 2,4-дифенил-7,8-бензо-5,6-дигидроселенохромилия. Для соли значительная степень ингибирования может быть связана с активацией метиленовых групп в элементоорганическом катионе за счёт приобретения гетерокольцом положительного заряда.

3. В смеси селенорганического (диацетофенонилселенид, дигидроселенохромены, соль дигидроселенохромилия) или модельного соединения с ТБК не образуются продукты, имеющие полосы поглощения в видимой области спектра.

Благодарности

Авторы благодарят заместителя главного редактора журнала, директора Института химии СГУ, заведующего кафедрой органической и биоорганической химии СГУ, доктора химических наук, профессора Ольгу Васильевну Федотову и члена редакционной коллегии журнала, принимающего редактора журнала, заведующего кафедрой полимеров СГУ (на базе ООО «Акрипол» (г. Саратов)), доктора химических наук, профессора Анну Борисовну Шиповскую за ценные советы и обсуждение.

Список литературы

1. Vertuani S., Angusti A., Manfredini S. The Antioxidants and Pro-Antioxidants Network : An Overview // Current Pharmaceutical Design. 2004. Vol. 10, № 14. P. 1677–1694. DOI: 10.2174/1381612043384655
2. Apel K., Hirt H. Reactive Oxygen Species: Metabolism, Oxidative Stress, and Signal Transduction // Annu Rev. Plant Biol. 2004. Vol. 55. P. 373–399. DOI: 10.1146/annurev.arplant.55.031903.141701
3. Mishra V., Shah Ch., Mokalsh N., Chavan R., Yadav H., Prajapati J. Probiotics As Potential Antioxidants : A Systematic Review // J. Agric. Food Chem. 2015. Vol. 63, № 14. P. 3615–3626. DOI: 10.1021/jf506326t
4. Панкратов А. Н., Цивилева О. М., Белобородова А. С., Цымбал О. А., Древкин Я. Б. Антиоксидантный статус мицелия макробазидиомицетов, выращенных с добавлением селенорганических соединений // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология. 2017. Т. 17, вып. 3. С. 286–298. DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9775-2017-17-3-286-298>
5. Сибгатуллина Г. В., Хаертдинова Л. Р., Гумерова Е. А., Акулов А. Н., Костюкова Ю. А., Никонорова Н. А., Румянцев Н. И. Методы определения редокс-статуса культивируемых клеток растений. Казань : Казан. (Приволжский) Федер. ун-т, Биол.-почв. фак., каф. генетики, 2011. 61 с.
6. Бучаченко А. Л., Вассерман А. М. Стабильные радикалы. Электронное строение, реакционная способность и применение. М. : Химия, 1973. 408 с.
7. Розанцев Э. Г., Шолле В. Д. Органическая химия свободных радикалов. М.: Химия, 1979. 344 с.
8. Нонхивел Д., Волтон Дж. Химия свободных радикалов. Структура и механизм реакций / пер. с англ. М. Г. Гольдфельда ; под ред. И. П. Белецкой. М. : Мир, 1977. 608 с. [Nonhebel D. C., Walton J. C. Free-Radical Chemistry : Structure and Mechanism / With a foreword by J. M. Tedder. Cambridge : Cambridge Univ. Press, 1974. 572 p.]
9. Нонхивел Д., Теддер Дж., Волтон Дж. Радикалы / пер. с англ. В. А. Смита. М. : Мир, 1982. 268 с. [Nonhebel D. C., Tedder J. M., Walton J. C. Radicals. Cambridge; London ; New York ; Melbourne : Cambridge Univ. Press, 1979. 200 p. (Cambridge chemistry texts)].



10. Владимиров Ю. А., Арчаков А. И. Перекисное окисление липидов в биологических мембранах / отв. ред. Г. М. Франк. М. : Наука, 1972. 252 с.
11. Свободнорадикальное окисление липидов в норме и патологии : материалы симпозиума (Москва, 2–4 июня, 1976) / отв. ред. Ю. М. Петрусевич. М. : Наука. Гл. ред. вост. лит., 1976. 200 с.
12. Барабой В. А., Орёл В. Э., Карнаух И. М. Перекисное окисление и радиация / отв. ред. Д. М. Гродзинский. Киев : Наук. думка, 1991. 256 с.
13. Волкова Н. П., Воспельникова Н. Д., Силаева С. А., Голенченко В. А., Рубцова Г. В., Павлова Н. А., Авдеева Л. В., Губарева А. Е., Алейникова Т. Л., Воробьёва С. А., Андрианова Л. Е., Силюянова С. Н., Лесничук С. А., Осипов Е. В., Лихачёва Н. В., Корлякова О. В., Зезеров Е. Г., Титова Т. А. Биохимия. Краткий курс с упражнениями и задачами / под ред. Е. С. Северина, А. Я. Николаева. М. : ГЭОТАР-Медиа, 2005. 448 с. (XXI век).
14. Алейникова Т. Л., Авдеева Л. В., Андрианова Л. Е., Белушикина Н. Н., Волкова Н. П., Воробьева С. А., Голенченко В. А., Губарева А. Е., Корлякова О. В., Лихачева Н. В., Павлова Н. А., Рубцова Г. В., Силаева С. А., Силюянова С. Н., Титова Т. А. Биохимия / под ред. Е. С. Северина. М. : ГЭОТАР-Медиа, 2006. 784 с.
15. Владимиров Ю. А., Потапенко А. Я. Физико-химические основы фотобиологических процессов. М. : Дрофа, 2006. 287 с.
16. Repetto M., Semprine J., Boveris A., Kancheva V. D., Kasaikina O. T., Ali Hassan H., Abd El-Aal M., González P. M., Piloni N. E., Puntarulo S., Ilie M., Margina D., Sochor J., Ruttkay-Nedecky B., Babula P., Adam V., Hubalek J., Kizek R., Kaurinovic B., Popovic M., Fagali N., Catalá A., Mimica-Dukić N., Simin N., Svirčev E., Orčić D., Beara I., Lesjak M., Božin B., Jaarin K., Kamisah Y., Toyosaki T., Nieto G., Ros G., Kiang J. G., Fukumoto R., Gorbunov N. V., Rossi M. A., Özkaya Y. G., Carrillo M. C., Luján M. de Alvarez, Parody J. P., Quiroga A. D., Ceballos M. P., Sousa T., Afonso J., Albino-Teixeira A., Carvalho F., Fantinelli J. C., Pérez-Núñez I. A., González Arbeláez L. F., Mosca S. M., Pillon N. J., Soulage Ch. O., Naudí A., Jové M., Ayala V., Ramírez O., Cabré R., Prat J., Portero-Otin M., Ferrer I., Pamplona R., Kísic B., Miric D., Zoric L., Ilic A., Shimizu I., Shimamoto N., Saiki K., Furujō M., Osawa K., Kanunnikova N. P., Bashun N. Z., Moiseenok A. G., Vagula M. C., Konieszko E. M. Lipid Peroxidation / ed. by A. Catalá. InTech, 2012. 546 p. Электронный вариант: URL: <http://www.intechopen.com/books/lipid-peroxidation>
17. Тихонов И. В., Плисс Е. М., Бородин Л. И., Сень В. Д. Супероксидные радикалы в кинетике ингибированного нитроксильными радикалами окисления метиллинолеата в мицеллах // Химическая физика. 2017. Т. 36, № 6. С. 20–23. DOI: 10.1134/S1990793117030253
18. Ланкин В. З., Шумаев К. Б., Тихазе А. К., Курганов Б. И. Влияние дикарбониллов на кинетические характеристики глутатионпероксидазы // Докл. АН (Россия). 2017. Т. 475, № 6. С. 706–709. DOI: 10.1134/S1607672917040123
19. Пат. 2051681 Российская Федерация. МПК 6 А 61 К 33/04. Средство для лечения и профилактики болезней, вызываемых недостаточностью селена в организме сельскохозяйственных животных и птиц / Древо Б. И., В. А. Антипов, О. И. Жуков, Л. А. Фоменко, Л. И. Маркова, Р. И. Древо, Т. Н. Родионова, В. И. Ефремов, В. Г. Харченко. Заявл. 24.09.1993, № 93045743/15; Опубл. 10.01.1996. 12 с. // Изобретения (заявки и патенты). 1996. Бюл. № 1 (II ч.). С. 161.
20. Пат. 2171110 Российская Федерация. МПК 7 А 61 К 33/04. Средство для лечения и профилактики инфекционных заболеваний и отравлений животных и птиц, повышающее их продуктивность и сохранность / Древо Б. И., Р. И. Древо, В. А. Антипов, Б. А. Чернуха, А. Н. Яковлев. Заявл. 26.05.1999, № 99111064/13; Опубл. 27.07.2001. 16 с. // Изобретения. Полезные модели. 2001. Бюл. № 21 (II ч.). С. 219.
21. Древо Я. Б., Федотова О. В. Синтез первых представителей бензаннелированных дигидроселенохромонов // Химия гетероцикл. соед. 2006. № 10. С. 1586–1587. DOI: 10.1007/s10593-006-0253-5
22. Хайруллина В. Р., Герчиков А. Я., Гарифуллина Г. Г., Древо Я. Б., Федотова О. В. Антиокислительные свойства 2,4-дифенил-7,8-бензо-5,6-дигидро(4H)селенохромена и 2-пара-хлорфенил-4-фенил-7,8-бензо-5,6-дигидро(4H)селенохромена // Кинетика и катализ. 2010. Т. 51, № 1. С. 43–46. DOI: 10.1134/s0023158410010076
23. Хайруллина В. Р., Герчиков А. Я., Ильина Е. А., Древо Я. Б., Исаева А. Ю., Древо Б. И. Антиокислительные свойства некоторых производных 7,8-бензо-5,6-дигидро(4H)селенохромена // Кинетика и катализ. 2013. Т. 54, № 1. С. 16–19. DOI: 10.1134/s0023158413010096
24. Древо Я. Б., Осина Т. С., Федотова О. В., Древо Б. И. Реакция восстановления 2,4-диарил-7,8-бензо-5,6-дигидроселенохромонов // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология. 2015. Т. 15, вып. 2. С. 5–7.
25. Шлютер М., Шэм Л. Теория функционала плотности // Физика за рубежом. Теория поля. Жидкие кристаллы. Физика твёрдого тела. Астро- и геофизика. Новости физики : сб. науч.-поп. ст. / пер. с англ. Л. М. Блинова [и др.]. М. : Мир, 1983. С. 179–203.
26. Koch W., Holthausen M. C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Toronto : Willey-VCH, 2001. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043
27. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физ. наук. 2002. Т. 172, № 3. С. 336–348. DOI: 10.3367/UFN.0172.200203e.0336.
28. Sousa S. F., Fernandes P. A., Ramos M. J. General Performance of Density Functionals // J. Phys. Chem. A. 2007. Vol. 111, № 42. P. 10439–10452. DOI: 10.1021/jp0734474
29. Becke A. D. Density-Functional Exchange-Energy Approximation with Correct Asymptotic Behavior // Phys. Rev. A. 1988. Vol. 38, № 6. P. 3098–3100. DOI: 10.1103/physreva.38.3098
30. Becke A. D. Density-Functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98, № 7. P. 5648–5652. DOI: 10.1063/1.464913
31. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-



- Salvetti Correlation-Energy Formula into a Functional of the Electron Density // *Phys. Rev. B*. 1988. Vol. 37, № 2. P. 785–789. DOI: 10.1103/physrevb.37.785
32. Krishnan R., Binkley J. S., Seeger R., Pople J. A. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. XX. A Basis Set for Correlated Wave Functions // *J. Chem. Phys.* 1980. Vol. 72, № 1. P. 650–654. DOI: 10.1063/1.438955
33. McLean A. D., Chandler G. S. Contracted Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations. I. Second Row Atoms, $Z = 11-18$ // *J. Chem. Phys.* 1980. Vol. 72, № 10. P. 5639–5648. DOI: 10.1063/1.438980
34. Reed A. E., Curtiss L. A., Weinhold F. Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital, Donor-Acceptor Viewpoint // *Chem. Rev.* 1988. Vol. 88, № 6. P. 899–926. DOI: 10.1021/cr00088a005
35. Немухин А. В., Вейнхольд Ф. Концепция Льюиса в современной квантовой химии // *Рос. хим. журн. (Журн. Рос. хим. о-ва им. Д. И. Менделеева)*. 1994. Т. 38, № 6. С. 5–11.
36. Weinhold F., Landis C. R. Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2005. 760 p. DOI: 10.1017/CB09780511614569
37. Glendening E. D., Landis C. R., Weinhold F. Natural Bond Orbital Methods // *WIREs Comput. Mol. Sci.* 2012. Vol. 2, № 1. P. 1–42. DOI: 10.1002/wcms.51
38. Mayer I. Bond Orders and Energy Components: Extracting Chemical Information from Molecular Wave Functions. Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2016. 239 p. DOI: 10.1201/9781315374895
39. Glendening E. D., Reed A. E., Carpenter J. E., Weinhold F. A. NBO Version 3.1, 1995.
40. Schlegel H. B., McDouall J. J. W. Do You Have SCF Stability and Convergence Problems? // *Computational Advances in Organic Chemistry: Molecular Structure and Reactivity* / eds. C. Ögretir, I. G. Csizmadia. The Netherlands: Kluwer Academic, 1991. P. 167–185 (NATO-ASI Series C 330).
41. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Zakrzewski V. G., Montgomery J. A., Stratmann R. E., Burant J. C., Dapprich S., Millan J. M., Daniels A. D., Kudin K. N., Strain M. C., Farkas O., Tomasi J., Barone V., Cossi M., Cammi R., Mennucci B., Pomelli C., Adamo C., Clifford S., Ochterski J., Petersson G. A., Ayala P. Y., Cui Q., Morokuma K., Malich D. K., Rabuck A. D., Raghavachari K., Foresman J. B., Cioslowski J., Ortiz J. V., Baboul A. G., Stefanov B. B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Gomperts R., Martin R. L., Fox D. J., Keith T., Al-Laham M. A., Peng C. Y., Nanayakkara A., Gonzalez C., Challacombe M., Gill P. M. W., Johnson B., Chen W., Wong M. W., Andreas J. L., Head-Gordon M., Replogle E. S., Pople J. A. Gaussian 03, Revision B.03. Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 2003.
42. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии. М.: Мир, 2006. 684 с.
43. Преч Э., Бюльманн Ф., Аффольтер К. Определение строения органических соединений. Таблицы спектральных данных / пер. с англ. Б. Н. Тарасевича. М.: Мир; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. 438 с. (Методы в химии). [*Pretsch E., Bühlmann Ph., Affolter C. Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data*. Berlin: Heidelberg; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Singapore; Tokyo: Springer-Verlag, 2000. 422 p. Более позднее издание: *Pretsch E., Bühlmann Ph., Badertscher M. Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data*. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 433 p. DOI: 10.1007/978-3-540-93810-1].

Образец для цитирования:

Панкратов А. Н., Цивилева О. М., Цымбал О. А., Древо Я. Б., Тумский Р. С., Маракеева А. В. Выяснение возможности взаимодействия органических селенидов и соли дигидроселенохромия с дифенилпикрилгидразилом // *Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология*. 2019. Т. 19, вып. 1. С. 39–49. DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9775-2019-19-1-39-49>

Exploration of Possibilities for Organic Selenides and Dihydro-selenochromium Salt Interaction with Diphenylpicrylhydrazyl

A. N. Pankratov, O. M. Tsivileva, O. A. Tsymbal, Ya. B. Drevko, R. S. Tumskii, A. V. Marakaeva

Alexei N. Pankratov, <https://orcid.org/0000-0003-1719-4764>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya Str., Saratov 410012, Russia, PankratovAN@info.sgu.ru

Olga M. Tsivileva, <https://orcid.org/0000-0002-5269-349X>, Institute of Biochemistry and Physiology of Plants and Microorganisms of the Russian Academy of Sciences, 13 Entuziastov Ave., Saratov 410049, Russia, tsivileva@ibppm.ru

Oleg A. Tsymbal, <https://orcid.org/0000-0002-8834-7548>, Saratov Voltage-Machines Production Association (Limited Liability Company

"SEPO-ZEM"), 112, 50 Let Oktyabrya Ave., Saratov 410065, Russia, olegtsymbal1990@yandex.ru

Yaroslav B. Drevko, <https://orcid.org/0000-0003-4007-2140>, Saratov State Agrarian University named after N. I. Vavilov, 335 Sokolovaya Str., Saratov 410005, Russia, drevko@list.ru

Roman S. Tumskii, <https://orcid.org/0000-0003-2789-5994>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya Str., Saratov 410012, Russia, roma_ronaldinho@rambler.ru

Anastasiya V. Marakaeva, <https://orcid.org/0000-0002-1378-6861>, Saratov State University, 83 Astrakhanskaya Str., Saratov 410012, Russia, marakaeva_anastasiya@mail.ru

Higher fungi – basidiomycetes play significant role as food and biological subjects for establishing the regularities of the living systems' operation, development and response to the different-nature effectors



impact. Insufficient activity of the living organisms' antioxidant system interfering the ability of overcoming the negative consequences of oxidative stress (excessive level of free radicals in cells) is believed to be a reason for the organisms aging and death. For enhancing the sustainability of mushroom cultures to the oxidative stress, and for providing their adequate redox status in respect to cytodifferentiation and transition to the generative stage, antioxidants are utilized. Profound antioxidant properties are attributed to the compounds of selenium, which is also an essential microelement. One of the antioxidant action indicators is the antiradical activity determined by means of the reaction occurring with the participation of stable free radical diphenylpicrylhydrazyl (DPPH) ($C_6H_5)_2N-N^{\cdot}-C_6H_2(NO_2)_3-2,4,6$. Another important antioxidant activity rate is the lipid peroxidation (LPO) level assessed by the reaction the reaction with thiobarbituric acid. In view of toxicity of inorganic selenium compounds, just the organoselenium ones are promising as the antioxidant and microelement supplementations at the basidiomycetes cultivation. With a view to future testing of the aforesaid compounds as a kind of supplement, their own possible interaction with DPPH and TBA must be explored to take that into account. That is why the implementation of reference reactions between the organoselenium compounds and DPPH should be provided. The present work is aimed to clarify the possibilities of interaction of three organic selenides and dihydroselechromilium salt with DPPH. Conventional determination techniques for the antiradical activity and LPO level have been adjusted to the research goal. By means of spectrophotometric method involving quantum chemical computations at a B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory, and NBO-analysis, we studied a number of organoselenium and model compounds interaction with DPPH and TBA. It has been shown that diacetophenonylselenide $C_6H_5COCH_2SeCH_2COC_6H_5$ barely inhibits DPPH. The inhibition level is rather high with 2-(4-bromophenyl)-4-phenyl-7,8-benzo-5,6-dihydro-4H-selenochromene, and especially with 2,4-diphenyl-7,8-benzo-5,6-dihydroselechromilium perchlorate. Considerable extent of inhibition of the latter salt could be related to the activation of methylene groups in organoelement cation on account of positive charge acquisition by heteroring. The mixture of organoselenium (diacetophenonylselenide, dihydroselechromenes, dihydroselechromilium salt) or model compound with TBA does not yield any products with the absorbance bands in the visible spectrum region.

Keywords: organoselenium compounds, diacetophenonylselenide, dihydroselechromenes, dihydroselechromilium salts, DPPH, thiobarbituric acid, inhibition, spectrophotometry, quantum chemical computations, density functional theory, B3LYP, NBO analysis.

Acknowledgements: The authors would like to thank Deputy Editor-in-Chief of this Journal, Director of the Institute of Chemistry of the N. G. Chernyshevskii National Research Saratov State University, Head of the Division of Organic and Bioorganic Chemistry, Doctor of Chemical Sciences (Highest Degree), Professor Olga V. Fedotova and Editorial Board Member of this Journal, receiving Editor of the Journal, Head of the Division of Polymers of the N. G. Chernyshevskii National Research Saratov State University (on the base of OOO "Acrypol" (Saratov, Russia)), Doctor of Chemical Sciences (Highest Degree), Professor Anna B. Shipovskaya for valuable advice and discussion.

References

1. Vertuani S., Angusti A., Manfredini S. The Antioxidants and Pro-Antioxidants Network: An Overview. *Current Pharmaceutical Design*, 2004, vol. 10, no. 14, pp. 1677–1694. DOI: 10.2174/1381612043384655
2. Apel K., Hirt H. Reactive Oxygen Species: Metabolism, Oxidative Stress, and Signal Transduction. *Annu Rev. Plant Biol.*, 2004, vol. 55, pp. 373–399. DOI: 10.1146/annurev.arplant.55.031903.141701
3. Mishra V., Shah Ch., Mokashe N., Chavan R., Yadav H., Prajapati J. Probiotics As Potential Antioxidants: A Systematic Review. *J. Agric. Food Chem.*, 2015, vol. 63, no. 14, pp. 3615–3626. DOI: 10.1021/jf506326t
4. Pankratov A. N., Tsvivleva O. M., Beloborodaya A. S., Tsymbal O. A., Drevko Ya. B. Antioxidant Status of Macrobasiidiomycetes Mycelium Grown in the Presence of Organoselenium Compounds. *Izv. Saratov Univ. (N. S.), Ser. Chemistry. Biology. Ecology*, 2017, vol. 17, iss. 3, pp. 286–298 (in Russian). DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9775-2017-17-3-286-298>
5. Sibgatullina G. V., Khaertdinova L. R., Gumerova E. A., Akulov A. N., Kostyukova Yu. A., Nikonrova N. A., Rummyantseva N. I. *Metody opredeleniya redoks-statusa kul'tiviruemyykh kletok rastenii* [Methods of Determination of the Redox Status of Cultivated Plant Cells], Kazan, Kazan. (Privolzhskii) federal. un-t, Biol.-pochv. fak., kaf. genetiki, 2011. 61 p. (in Russian).
6. Buchachenko A. L., Vasserman A. M. *Stabil'nye radikaly. Elektronnoe stroenie, reaktivnaya sposobnost' i primeneniye* [Stable Radicals. Electronic Structure, Reactivity and Application]. Moscow, Khimiya Publ., 1973. 408 p. (in Russian).
7. Rozantsev E. G., Sholle V. D. *Organicheskaya khimiya svobodnykh radikalov* [Organic Chemistry of Free Radicals]. Moscow, Khimiya Publ., 1979. 344 p. (in Russian).
8. Nonhebel D. C., Walton J. C. *Free-Radical Chemistry: Structure and Mechanism* / with a foreword by J. M. Tedder. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1974. 572 p.
9. Nonhebel D. C., Tedder J. M., Walton J. C. *Radicals*. Cambridge, London, New York, Melbourne, Cambridge Univ. Press, 1979. 200 p. (Cambridge chemistry texts).
10. Vladimirov Yu. A., Archakov A. I. *Perekisnoe okislenie lipidov v biologicheskikh membranakh* [Peroxide Oxidation of Lipids in Biological Membranes]. Moscow, Nauka Publ., 1972. 252 p. (in Russian).
11. *Svobodnoradikal'noe okislenie lipidov v norme i patologii: Materialy simpoziuma*. Moskva, 2–4 iyunya, 1976 [Free Radical Oxidation of Lipids in the Norm and Pathology: Proceedings of the Symposium. Moscow, June 2–4 1976]. Moscow, Nauka Publ., gl. red. vost. lit., 1976. 200 p. (in Russian).
12. Baraboi V. A., Orel V. E., Karnaukh I. M. *Perekisnoe okislenie i radiatsiya* [Peroxide Oxidation and Radiation]. Ed. D. M. Grodzinskii. Kiev, Naukova Dumka Publ., 1991. 256 p.
13. Volkova N. P., Vospel'nikova N. D., Silaeva S. A., Golenchenko V. A., Rubtsova G. V., Pavlova N. A., Avdeeva L. V., Gubareva A. E., Aleinikova T. L., Vorob'eva S. A., Andrianova L. E., Siluyanova S. N., Lesnichuk S. A.,



- Osipov E. V., Likhacheva N. V., Korlyakova O. V., Zezerov E. G., Titova T. A. *Biokhimiya. Kratkii kurs s upravleniyami i zadachami* [Biochemistry. A Brief Course with Exercises and Tasks]. Eds. E. S. Severin, A. Ya. Nikolaev. Moscow, GEOTAR-Media Publ., 2005. 448 p. (XXI Century) (in Russian).
14. Aleinikova T. L., Avdeeva L. V., Andrianova L. E., Belushkina N. N., Volkova N. P., Vorob'eva S. A., Golenchenko V. A., Gubareva A. E., Korlyakova O. V., Likhacheva N. V., Pavlova N. A., Rubtsova G. V., Silaeva S. A., Siluyanov S. N., Titova T. A. *Biokhimiya* [Biochemistry]. Ed. E. S. Severin. Moscow, GEOTAR-Media Publ., 2006. 784 p. (in Russian).
 15. Vladimirov Yu. A., Potapenko A. Ya. *Fiziko-Khimicheskie Osnovy Fotobiologicheskikh Protessov* [Physicochemical Bases of Photobiological Processes]. Moscow, Drofa Publ., 2006. 287 p. (in Russian).
 16. Repetto M., Semprine J., Boveris A., Kancheva V. D., Kasaikina O. T., Ali Hassan H., Abd El-Aal M., González P. M., Piloni N. E., Puntarulo S., Ilie M., Margină D., Sochor J., Ruttkay-Nedecky B., Babula P., Adam V., Hubalek J., Kizek R., Kaurinovic B., Popovic M., Fagali N., Catalá A., Mimica-Dukić N., Simin N., Svirčev E., Orčić D., Beara I., Lesjak M., Božin B., Jaarin K., Kamisah Y., Toyosaki T., Nieto G., Ros G., Kiang J. G., Fukumoto R., Gorbunov N. V., Rossi M. A., Özkaya Y. G., Carrillo M. C., Luján M. de Alvarez, Parody J. P., Quiroga A. D., Ceballos M. P., Sousa T., Afonso J., Albino-Teixeira A., Carvalho F., Fantinelli J. C., Pérez-Núñez I. A., González Arbeláez L. F., Mosca S. M., Pillon N. J., Soulage Ch. O., Naudí A., Jové M., Ayala V., Ramírez O., Cabré R., Prat J., Portero-Otin M., Ferrer I., Pamplona R., Kisic B., Miric D., Zoric L., Ilic A., Shimizu I., Shimamoto N., Saiki K., Furujo M., Osawa K., Kanunnikova N. P., Bashun N. Z., Moiseenok A. G., Vagula M. C., Konieszko E. M. *Lipid Peroxidation*. Ed. by A. Catalá. InTech, 2012. 546 p. Available at: <http://www.intechopen.com/books/lipid-peroxidation>
 17. Tikhonov I. V., Pliss E. M., Borodin L. I., Sen' V. D. Superoxide Radicals in the Kinetics of Nitroxide-Inhibited Oxidation of Methyl Linoleate in Micelles. *Russ. J. Phys. Chem. B: Focus on Physics*, 2017, vol. 11, no. 3, pp. 400–402 (in Russian). DOI: 10.1134/S1990793117030253
 18. Lankin V. Z., Shumaev K. B., Tikhaze A. K., Kurganov B. I. Influence of Dicarboxyls on Kinetic Characteristics of Glutathionperoxidase. *Doklady Biochemistry and Biophysics*, 2017, vol. 475, no. 1, pp. 287–290 (in Russian). DOI: 10.1134/S1607672917040123
 19. Pat. 2051681 RF. MPK 6A 61 K 33/04. Sredstvo dlya lecheniya i profilaktiki boleznei, vyzyvaemykh nedostatocnost'yu selena v organizme sel'skokhozyaistvennykh zhivotnykh i ptits [Remedy for Treatment and Prophylactics of Diseases Caused by Selenium Deficiency in Organisms of Agricultural Animals and Poultry]. B. I. Drevko, V. A. Antipov, O. I. Zhukov, L. A. Fomenko, L. I. Markova, R. I. Drevko, T. N. Rodionova, V. I. Efremov, V. G. Kharchenko. Zayavleno 24.09.1993, № 93045743/15; Opublikovano 10.01.1996. 12 s. *Izobreteniya (zayavki i patenty)*. Filed 24.09.1993, no. 93045743/15; Published 10.01.1996, 12 pp. [Inventions (Claims and Patents)]. Bull. no. 1 (II part), p. 161] (in Russian).
 20. Pat. 2171110 RF. MPK 7A 61 K 33/04. Sredstvo dlya lecheniya i profilaktiki infektsionnykh zabozevanii i otravlenii zhivotnykh i ptits, povyshayushchee ikh produktivnost' i sokhrannost' [Remedy for Treatment and Prophylactics of Infectious Diseases and Poisonings of Animals and Poultry Enhancing Their Productivity and Vitality]. B. I. Drevko, R. I. Drevko, V. A. Antipov, B. A. Chernukha, A. N. Yakovlev. Zayavleno 26.05.1999, № 99111064/13; Opubl. 27.07.2001. 16 s. *Izobreteniya. Poleznye modeli* [Inventions. Useful Models], 2001. Byulleten' № 21 (II part). S. 219. Patent no. 2171110 of the Russian Federation, MPK 7A 61 K 33/04, Filed 26.05.1999, no. 99111064/13; Published 27.07.2001, 16 pp.; 2001, Bull. no. 21 (II part), p. 219] (in Russian).
 21. Drevko Ya. B., Fedotova O. V. Synthesis of the First Representatives of Benzannellated Dihydroselenochromenes. *Chem. Heterocyclic Compds.*, 2006, vol. 42, no. 10, pp. 1372–1373. DOI: 10.1007/s10593-006-0253-5
 22. Khairullina V. R., Gerchikov A. Ya., Garifullina G. G., Drevko Ya. B., Fedotova O. V. Antioxidant Properties of 2,4-Diphenyl-7,8-benzo-5,6-dihydro(4H)selenochromene and 2-para-Chlorophenyl-4-phenyl-7,8-benzo-5,6-dihydro(4H)selenochromene. *Kinetics and Catalysis*, 2010, vol. 51, no. 1, pp. 38–41. DOI: 10.1134/s0023158410010076
 23. Khairullina V. R., Gerchikov A. Ya., Il'ina E. A., Drevko Ya. B., Isaeva A. Yu., Drevko B. I. Antioxidant Properties of Some 7,8-Benzo-5,6-dihydro(4H)selenochromene Derivatives. *Kinetics and Catalysis*, 2013, vol. 51, no. 1, pp. 14–17. DOI: 10.1134/s0023158413010096
 24. Drevko Ya. B., Osina T. S., Fedotova O. V., Drevko B. I. Reduction Reaction of 2,4-Diaryl-7,8-benzo-5,6-dihydroselenochromenes. *Izv. Saratov Univ. (N. S.), Ser. Chemistry. Biology. Ecology*, 2015, vol. 15, iss. 2, pp. 5–7 (in Russian).
 25. Shlüter M., Sham L. Teoriya funktsionala plotnosti [Density Functional Theory]. In: *Fizika za rubezhom. Teoriya polya. Zhidkie kristally. Fizika tverdogo tela. Astro- i geofizika. Novosti fiziki: sb. nauch.-pop. st.* Perevod s angl. L. M. Blinova et al. [Physics Abroad: Collection of Popular Science Articles. Field Theory. Liquid Crystals. Solid State Physics. Astro- and Geophysics. Novelties of Physics]. Moscow, Mir Publ., 1983, pp. 179–203 (in Russian).
 26. Koch W., Holthausen M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. Toronto, Wiley-VCH, 2001. 293 p. DOI: 10.1002/3527600043
 27. Kohn W. Electronic Structure of Substance – Wave Functions and Density Functionals. *Physics – Uspekhi*, 2002, vol. 172, no. 3, pp. 336–348 (in Russian). DOI: 10.3367/UFNr.0172.200203e.0336. (Engl. ed.: Kohn W. Nobel Lecture: Electronic Structure of Matter – Wave Functions and Density Functionals. *Rev. Mod. Phys.*, 1999, vol. 71, no. 5, pp. 1253–1266. DOI: 10.1103/revmodphys.71.1253).
 28. Sousa S. F., Fernandes P. A., Ramos M. J. General Performance of Density Functionals. *J. Phys. Chem. A*, 2007, vol. 111, no. 42, pp. 10439–10452. DOI: 10.1021/jp0734474
 29. Becke A. D. Density-Functional Exchange-Energy Approximation with Correct Asymptotic Behavior. *Phys. Rev. A*, 1988, vol. 38, no. 6, pp. 3098–3100. DOI: 10.1103/physreva.38.3098



30. Becke A. D. Density-Functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange. *J. Chem. Phys.*, 1993, vol. 98, no. 7, pp. 5648–5652. DOI: 10.1063/1.464913
31. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula into a Functional of the Electron Density. *Phys. Rev. B*, 1988, vol. 37, no. 2, pp. 785–789. DOI: 10.1103/physrevb.37.785
32. Krishnan R., Binkley J. S., Seeger R., Pople J. A. Self-Consistent Molecular Orbital Methods. XX. A Basis Set for Correlated Wave Functions. *J. Chem. Phys.*, 1980, vol. 72, no. 1, pp. 650–654. DOI: 10.1063/1.438955
33. McLean A. D., Chandler G. S. Contracted Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations. I. Second Row Atoms, $Z = 11-18$. *J. Chem. Phys.*, 1980, vol. 72, no. 10, pp. 5639–5648. DOI: 10.1063/1.438980
34. Reed A. E., Curtiss L. A., Weinhold F. Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital, Donor-Acceptor Viewpoint. *Chem. Rev.*, 1988, vol. 88, no. 6, pp. 899–926. DOI: 10.1021/cr00088a005
35. Nemukhin A. V., Weinhold F. Kontseptsiya L'yisa v sovremennoi kvantovoi khimii [Lewis Concept in Modern Quantum Chemistry]. *Rossiiskii Khimicheskii Zhurnal (Zhurnal Rossiiskogo Khimicheskogo Obshchestva imeni D. I. Mendeleeva)* [Mendeleev Chemistry Journal {Russian Chemical Journal (Journal of the D. I. Mendeleev Russian Chemical Society) (in Russian: Rossiiskii Khimicheskii Zhurnal (Zhurnal Rossiiskogo Khimicheskogo Obshchestva imeni D. I. Mendeleeva)}], 1994, vol. 38, no. 6, pp. 5–11 (in Russian).
36. Weinhold F., Landis C. R. *Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective*. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 2005. 760 p. DOI: 10.1017/CB09780511614569
37. Glendening E. D., Landis C. R., Weinhold F. Natural Bond Orbital Methods. *WIREs Comput. Mol. Sci.*, 2012, vol. 2, no. 1, pp. 1–42. DOI: 10.1002/wcms.51
38. Mayer I. *Bond Orders and Energy Components: Extracting Chemical Information from Molecular Wave Functions*. Boca Raton, CRC Press, Taylor & Francis Group, 2016. 239 p. DOI: 10.1201/9781315374895
39. Glendening E. D., Reed A. E., Carpenter J. E., Weinhold F. A. NBO Version 3.1, 1995.
40. Schlegel H. B., McDouall J. J. W. Do You Have SCF Stability and Convergence Problems? *Computational Advances in Organic Chemistry: Molecular Structure and Reactivity*. Eds. C. Ögretir, I. G. Csizmadia. The Netherlands, Kluwer Academic, 1991, pp. 167–185 (NATO-ASI Series C 330).
41. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Zakrzewski V. G., Montgomery J. A., Stratmann R. E., Burant J. C., Dapprich S., Millan J. M., Daniels A. D., Kudin K. N., Strain M. C., Farkas O., Tomasi J., Barone V., Cossi M., Cammi R., Mennucci B., Pomelli C., Adamo C., Clifford S., Ochterski J., Petersson G. A., Ayala P. Y., Cui Q., Morokuma K., Malich D. K., Rabuck A. D., Raghavachari K., Foresman J. B., Cioslowski J., Ortiz J. V., Baboul A. G., Stefanov B. B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Gomperts R., Martin R. L., Fox D.J., Keith T., Al-Laham M. A., Peng C. Y., Nanayakkara A., Gonzales C., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong M. W., Andreas J. L., Head-Gordon M., Replogle E. S., Pople J. A. *Gaussian 03, Revision B.03*. Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 2003.
42. Pentin Yu. A., Vilkov L. V. *Fizicheskie metody issledovaniya v khimii* [Physical Research Methods in Chemistry]. Moscow, Mir Publ., 2006. 684 p. (in Russian).
43. Pretsch E., Bühlmann Ph., Badertscher M. *Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data*. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2009. 433 p. DOI: 10.1007/978-3-540-93810-1

Cite this article as:

Pankratov A. N., Tsivileva O. M., Tsymbal O. A., Drevko Ya. B., Tumskii R. S., Marakaeva A. V. Exploration of Possibilities for Organic Selenides and Dihydroarsenochromium Salt Interaction with Diphenylpicrylhydrazyl. *Izv. Saratov Univ. (N. S.), Ser. Chemistry. Biology. Ecology*, 2019, vol. 19, iss. 1, pp. 39–49 (in Russian). DOI: <https://doi.org/10.18500/1816-9775-2019-19-1-39-49>