

چکیده

در پژوهش حاضر، سینتیک و مکانیسم واکنش اسید گالیک و متیل گالات در مهار رادیکال $\text{DPPH}^\bullet$ در طیفی از حلال‌های شیمیایی مورد مطالعه قرار گرفت. برای این منظور، پارامترهای سینتیکی از جمله ثابت سرعت ظاهری، ثابت سرعت مرتبه دوم و توانایی دادن هیدروژن آنتی‌اکسیدان و سایر پارامترهای مربوط به آزمون $\text{DPPH}^\bullet$ مانند دسترسی فضایی به جایگاه واکنش رادیکال، غلظت موثره (IC_{50}) و استوکیومتری واکنش محاسبه شدند. کاهش میزان جذب تابشی رادیکال $\text{DPPH}^\bullet$ در محدوده ۵۱۷ تا ۵۲۰ نانومتر در غلظت ثابت $\text{DPPH}^\bullet$ (حدود ۶۰ میکرومولار) و غلظت متغیر آنتی‌اکسیدان پایش شد. تفاوت معنی‌دار مقادیر ثابت سرعت مرتبه دوم در حلال‌های الکلی نسبت به سایر حلال‌ها نشان داد حلال قادر است مکانیسم واکنش را از مسیر اصلی انتقال اتم هیدروژن (HAT) به مکانیسم انتقال الکترون (SPLET) تغییر دهد. این حاکی از پشتیبانی حلال از یونیزاسیون آنتی‌اکسیدان و یا حمله نوکلئوفیلی و احیاء مجدد ساختمان شیمیایی آنتی‌اکسیدان است. به کمک بررسی سرعت اولیه واکنش و نسبت اختلاف غلظت $\Delta\text{DPPH}_f/\Delta\text{DPPH}_i$ در خصوص هر آنتی‌اکسیدان، واکنش اسید گالیک و متیل گالات با $\text{DPPH}^\bullet$ به سه گروه سریع، متوسط و آهسته تقسیم بندی شد. همچنین نشان داده شد میزان دسترسی فضایی و اثر ساختمان شیمیایی آنتی‌اکسیدان و حلال بر نزدیک شدن آنتی‌اکسیدان به محل جایگاه واکنش رادیکال، سینتیک واکنش را به طرز مشهودی تحت تاثیر قرار می‌دهند. سرانجام، مشخص گردید متیل گالات نسبت به اسید گالیک حائز نتایج ضعیف تری از نظر غلظت موثره و استوکیومتری واکنش است که این ممکن است به آزادی فضایی و دسترسی بهتر اسید گالیک به جایگاه واکنش رادیکال $\text{DPPH}^\bullet$ مربوط بوده باشد.

کلیدواژه‌ها: اسید گالیک، حلال، دسترسی فضایی، رادیکال $\text{DPPH}^\bullet$ ، سینتیک، فعالیت آنتی‌اکسیدانی، متیل گالات.