

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 541.62+547.918+547.972

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.008

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ СИСТЕМЫ ДИСАХАРИДОВ D-ГЛЮКОПИРАНОЗЫ И L-РАМНОПИРАНОЗЫ**Сергей Геннадьевич Мамылов^{1†}, Олег Иванович Ломовский²**^{1,2} Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, ул. Кутателадзе, 18, 630128, Новосибирск, Россия¹ mamylov@solid.nsc.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-2858-0441>² lomov@solid.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7043-1357>

Аннотация. Механохимическая активация природного сырья позволяет проводить извлечение ценных компонентов, например, флавоноидов. Названная обработка сырья с углеводами (сахарами) одновременно трансформирует малорастворимые соединения в водорастворимую форму. Флавоноид кверцетин интересен как перспективный антиоксидант, но обладает низкой растворимостью в воде. Для перевода его в растворимую форму в виде соединения с углеводом необходимо предварительно изучить стабильность различных соединений кверцетина и углеводов (сахаров). Используя аппарат молекулярной механики, проведено компьютерное моделирование соединений, образованных флавоноидом кверцетином и моносахаридами глюкозой и рамнозой. Учитывая реакционную способность углеводов, возникает вопрос о единственности реакции образования соединения кверцетина с углеводом и о возможности протекания параллельной реакции молекул углевода между собой. Методом компьютерного моделирования рассмотрены структуры дисахаридов, образующихся взаимодействием моносахаридов D-глюкопиранозы и L-рамнопиранозы. Изменение внутренней энергии моделируемых структур было выбрано количественным критерием для различных вариантов соединения углевода1 и углевода2, его можно считать энергией связывания моносахаридов в дисахарид. Предпочтительным типом образующихся дисахаридных структур из моносахаридов является образование кислородной мостиковой связи между 1-, 4-, 6-гидроксигруппами D-глюкопиранозы и 1-, 2-, 4-гидроксигруппами L-рамнопиранозы. При образовании дисахаридов через вышеприведенные гидроксигруппы выделяются два типа продуктов. Реакция между моносахаридами через кислородные мостики остовных атомов углерода демонстрирует получаемые значения энергии системы -50-0 кДж/моль. Подобные величины энергии отмечаются при образовании энергетически выгодных гликозидов кверцетина. На этом основании сделан вывод, что процессы образования моделируемых гликозидов кверцетина и образования дисахаридов являются параллельными. Второй тип продуктов – образование гликозидов через первично-спиртовую гидроксигруппу атома углерода C6 глюкопиранозы. Связывание также энергетически выгодное, но в природных соединениях не является преобладающим. Мостиковое связывание через положение C6 в полисахаридных цепочках доминирует при образовании трехмерных структур.

Ключевые слова: моделирование энергии системы дисахаридов, D-глюкопираноза, L-рамнопираноза, гликозид кверцетина.

Благодарности: Моделирование структур дисахаридов проводилось в рамках ГосЗадания ИХТТМ СО РАН, проект FWUS-2021-0005; расчет энергии связи дисахаридов проводился в рамках проекта РФФ 21-13-00046.

Для цитирования: Мамылов С.Г., Ломовский О.И. Моделирование энергии системы дисахаридов D-глюкопиранозы и L-рамнопиранозы // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 1. С. 69–76. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.008.

Original article

ENERGY SIMULATION OF THE DISACCHARIDE SYSTEM OF D-GLUCOPYRANOSE AND L-RHAMNOPYRANOSE**Sergey G. Mamylov^{1†}, Oleg I. Lomovsky²**^{1,2}Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS, Kutateladze Str., 18, Novosibirsk, 630128, Russia¹mamylov@solid.nsc.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-2858-0441>²lomov@solid.nsc.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7043-1357>

Abstract. Mechanochemical activation of natural raw materials allows the extraction of valuable components, for example, flavonoids. The named processing of raw materials with carbohydrates (sugars) simultaneously transforms poorly soluble compounds into a water-soluble form. The flavonoid quercetin is interesting as a promising antioxidant, but has low solubility in water. To convert it into a soluble carbohydrate form, it is necessary to first study the stability of various compounds of quercetin and carbohydrates (sugars). Using the apparatus of molecular mechanics, computer modeling of compounds formed by the flavonoid quercetin and the monosaccharides glucose and rhamnose was carried out. Taking into account the reactivity of carbohydrates, the question arises about the uniqueness of the reaction of the formation of a compound of quercetin with a carbohydrate and about the possibility of a concurrent reaction of carbohydrate molecules among themselves. The structures of disaccharides formed by the interaction of the monosaccharides D-glucopyranose and L-rhamnopyranose are considered by computer modeling. The change in the internal energy of the simulated structures was chosen as a quantitative criterion for variants of the compound of carbohydrate1 and carbohydrate2, it can be considered the binding energy of monosaccharides into disaccharide. The preferred type of disaccharide structures formed from monosaccharides is the formation of an oxygen bridging bond between the 1-, 4-, 6-hydroxygroups of D-glucopyranose and 1-, 2-, 4-hydroxygroups of L-rhamnopyranose. When disaccharides are formed through the above hydroxyl groups, two types of products are distinguished. The reaction between monosaccharides through the oxygen bridges of the backbone carbon atoms demonstrates the resulting energy values of the system -50-0 kJ/mol. Similar energy values are observed in the formation of energetically advantageous glycosides of quercetin. On this basis, it is concluded that the processes of formation of simulated quercetin glycosides and the formation of disaccharides are concurrent. The second type of products is the formation of glycosides through the primary alcohol hydroxyl group of the carbon atom C6 of glucopyranose. Binding is also energetically advantageous, but it is not predominant in natural compounds. Bridging through the C6 position in polysaccharide chains dominates the formation of three-dimensional structures.

Keywords: energy modeling of disaccharide system, D-glucopyranose, L-rhamnopyranose, quercetin glycoside.

Acknowledgements: The modeling of disaccharide structures was carried out within the framework of the State Assignment of the ISSCM SB RAS, project FWUS-2021-0005; the calculation of the binding energy of disaccharides was carried out within the framework of the RSF project 21-13-00046.

For citation: Mamylov, S. G. & Lomovsky, O. I. (2022). Energy simulation of the disaccharide system of D-glucopyranose and L-rhamnopyranose. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 1(19), 69–76. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.008.

Введение

Механохимическая активация (МА) природных моно-, олиго- и полисахаридов позволяет проводить ряд операций, недостижимых другими методами воздействия на природное растительное сырье. К таким методам можно отнести сухую экстракцию и образование гликозидов природных флавоноидов [1]. Взаимодействие реагентов в механохимическом реакторе не сопровождается значительным ростом температуры, при этом условия ударной нагрузки позволяют преодолеть активационный барьер реакции. Механохимическая активация

природного растительного сырья перспективна для применения в пищевой промышленности и кормопроизводстве [2].

Реакции механохимической экстракции растительного сырья обычно проводятся в присутствии щелочей [3] для получения экстрагированных фенольных соединений в щелочной водорастворимой форме. Такая обработка сопровождается щелочным гидролизом ряда полисахаридов, присутствующих в сырье [4]. В дальнейшем получаемые мономерные и олигомерные сахара могут принимать участие в других реакциях, в частности, реакциях гликозилирования. Известно также, что аморфизо-

ванная целлюлоза растительного сырья в присутствии воды может полимеризоваться, вплоть до восстановления кристаллической структуры целлюлозы [3].

Таким образом, присутствующие в растительном сырье углеводы могут принимать участие в ряде побочных превращений, изменяющих состав порошкового продукта. Изучение таких превращений обеспечит получение продукта с контролируемыми свойствами [5].

Ранее [6] моделировалось образование гликозидных структур кверцетина взаимодействием моносахарида и кверцетина. Учитывая заметную реакционную способность углеводов, стоит отметить, что наряду с образованием целевых продуктов (гликозидов кверцетина), в системе возможно образование соединений «моносахарид-моносахарид». При получении дисахаридов взаимодействием моносахаридов необходимо обеспечивать как направление реагирования, так и создание/сохранение структуры изомеров – регио- и стереоспецифичность. Возникает вопрос – можно ли получить все комбинации дисахаридов через гидроксильные группы (гидроксигруппы) моносахаридов без дополнительных защитных мер прямым взаимодействием, например, механохимическим активированием?

Одно из решений – моделирование энергии связывания образующихся структур. Количественный критерий при модельном исследовании – потенциальная энергия системы. При дальнейшем анализе можно оценить возможность и направление взаимодействия в различных условиях, например, при воздействии обработки.

Представляют интерес дисахариды, образованные взаимодействием глюкозы и рамнозы. Выбор моносахаридов обусловлен тем, что известен ряд природных дисахаридов, образованных этими моносахаридами. Поэтому прогностические результаты моделирования можно будет сравнить с реальным существованием рассматриваемых соединений.

Цель работы – модельное исследование потенциальной энергии системы дисахаридов, образованного из аномеров D-глюкопиранозы и L-рамнопиранозы, определение предпочтительно образующейся структуры.

Модельный эксперимент

Рассматриваемые в настоящей работе дисахариды являются соединениями с числом атомов порядка пятидесяти. Проведение срав-

нительного исследования ряда соединений позволяет рассматривать изучаемые структуры дисахаридов методом молекулярной механики, что сокращает время работы компьютерной программы. Моделирование структур дисахаридов осуществлялось в программе Ghemical [7]. Проводились оптимизация геометрии и расчет потенциальной энергии. Использовался потенциал – GhFF (Ghemical). Более вероятное состояние имеет более низкое значение потенциальной энергии.

В создаваемой модели рассматриваются комбинации «моносахарид1-моносахарид2», где моносахариды представлены D-глюкопиранозой и L-рамнопиранозой. Образование дисахаридов можно описать как взаимодействие гидроксильных групп моносахаридов с образованием простой эфирной связи через кислородный атом гидроксильной группы и отщеплением одной молекулы воды. Все молекулы сахаров рассматриваются только в циклической пиранозной форме (конформация «кресло»), влияние других форм не учитывается. Глюкоза и рамноза в пиранозной форме рассматриваются в альфа (α -) и бета (β -) аномерных модификациях.

Результаты и обсуждение

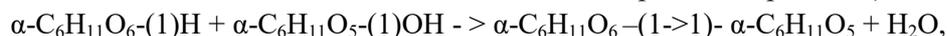
Рассматриваемые углеводы: D-глюкопираноза-брутто-формула $C_6H_{12}O_6$, $M = 180$ г/моль; L-рамнопираноза – брутто-формула $C_6H_{12}O_5$, $M = 164$ г/моль. D-глюкоза – наиболее термодинамически устойчивая гексоза [8], один из самых распространенных углеводов. Все значимые олиго- и полисахариды содержат в своем составе глюкопиранозную составляющую. L-рамнопираноза – важный компонент клеточных стенок некоторых бактерий. Шестичленные (пиранозные) циклы обоих углеводов существуют в форме двух α - и β -аномеров, в природе они находятся в сопоставимых количествах, за счет мутаротации в растворе между ними существует равновесие. α - и β -аномеры рассматриваемых пираноз отличаются только положением гликозидного гидроксила при атоме C1; в α -аномере он находится перпендикулярно плоскости цикла (аксиальное положение), в β -аномере лежит примерно в плоскости цикла. Вследствие этого, в β -D-глюкопиранозе все заместители экваториальны.

Для рассмотрения энергии структур введем условные обозначения:

возможны следующие комбинации дисахаридов $aXg-aYg$, $aXg-bYg$, $bXg-bYg$, $aXg-aYr$, $aXg-bYr$, $aXr-aYr$, $aXr-bYr$, $bXg-aYr$, $bXg-bYr$, $bXr-bYr$;

где: $a(b)$ – α -(β -) аномер моносахарида;

X, Y – место соединения, положение гидроксильной группы при X и Y атомах углерода



$$\text{при этом } \Delta E = E(aXg-aYg) + E(H_2O) - E(aXg) - E(aYg),$$

$$\text{или, для } \alpha, \alpha(1->1) \text{ связывания } \Delta E = E(a1g-a1g) + E(H_2O) - 2E(a1g),$$

где E – потенциальная энергия реагентов и продуктов, ΔE – изменение потенциальной энергии системы, энергия связывания.

первого и второго моносахаридов, соответственно;

g, r (glucose, rhamnose) – глюкопираноза и рамнопираноза.

Соответственно, формальная реакция образования дисахаридов из двух альфа-аномеров глюкопиранозы (α -D-глюкопиранозил-(1->1)- α -D-глюкопиранозид, трегалоза) запишется как:

Структурная формула молекулы получающегося дисахаридов представлена на рис.1.

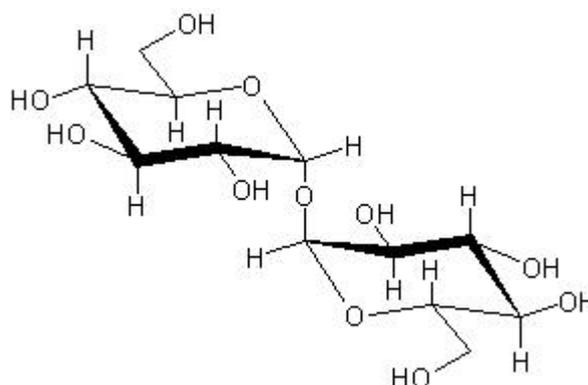


Рис.1. Структурная формула молекулы дисахаридов

Fig.1. Structural formula of a disaccharide molecule

Аналогичным образом можно записать реакции и энергии образования других дисахаридов.

В расчете учитываются только начальные и конечные молекулы. Поэтому рассматриваемые изменения потенциальной энергии (энергии связывания) представляют собой термодинамические параметры.

Рассматривая возможные комбинации моносахаридов, отметим следующее.

В случае дисахаридов, образованных одними и теми же моносахаридами, число серий ограничено тремя парами: $aXg-aYg$, $aXg-bYg$, $bXg-bYg$ и $aXr-aYr$, $aXr-bYr$, $bXr-bYr$. Сочетание $bXg-aYg$ ($bXr-aYr$) равносильно сочетанию $aXg-bYg$ ($aXr-bYr$). Внутри приведенных серий количество возможных дисахаридов определяется числом гидроксильных групп исходного моносахарида: для глюкопиранозы – 5, для рамнопиранозы – 4. Для дисахаридов, образованного из двух глюкопиранозных колец, максимальное число сочетаний (дисахаридов) равно 25, для рамнопиранозных колец число соче-

таний ограничено 16. Если при этом дисахарид построен из одинаковых (α - α , β - β) аномеров, имеющих одинаковые энергии, то внутри серии число различающихся состояний дополнительно уменьшается.

При рассмотрении дисахаридов, образованных разными моносахаридами (глюкоза-рамноза) и их различающимися аномерами, количество серий 4. Внутри серии число сочетаний (дисахаридов) составляет 20.

Известны природные дисахариды, образованные комбинацией глюкопиранозных колец с разными точками соединения и разными аномерными составляющими. Среди них упомянем трегалозу (микоза, грибковый сахар, α -D-глюкопиранозил-(1->1)- α -D-глюкопиранозид). Этот невосстанавливающий дисахарид образован комбинацией α -D-глюкопиранозных колец, соединенных через гликозидные атомы углерода C1. Восстанавливающий дисахарид мальтоза (солодовый сахар, α -D-глюкопиранозил-(1->4)- α (β -)-D-глюкопираноза) образован двумя D-глюкопиранозными кольцами, соединенными

гликозид-гликозной связью 1-4. Целлобиоза (β -D-глюкопиранозил-(1 \rightarrow 4)- α (β)-D-глюкопираноза встречается в соке некоторых деревьев, привлекательна с точки зрения дальнейшего образования природного полимера целлюлозы). Структура молекулы целлобиозы отличается от структуры молекулы мальтозы сменой положения атома кислорода при атоме углерода C1 с аксиального (α -) на экваториальное (β -).

Среди гетеродисахаридов (глюкоза-рамноза) упомянем рутинозу (α -L-

рамнопиранозил-(1 \rightarrow 6)- β -D-глюкопираноза). Для нее известно, что она получается гидролизом природного флавоноида рутина (софорина), а не синтезом из моносахаридов.

Среди всех рассмотренных серий дисахаридов, выделяются серии aXg-aYg (содержащая дисахарид трегалозу), aXg-bYg (мальтозу), bXg-bYg (целлобиозу), bXg-aYr (рутинозу). Для них приведены полученные моделированием значения энергии системы в Табл.1, 2.

Таблица 1. Энергия системы дисахаридов D-глюкопиранозы, кДж/моль: серия aXg-aYg – при образовании дисахаридов взаимодействуют α - α аномеры; серия aXg-bYg – α - β -аномеры; серия bXg-bYg – β - β -аномеры

Table 1. Energy of the D-glucopyranose disaccharide system, kJ/mol: aXg-aYg series – α - α anomers interact during disaccharide formation; aXg-bYg series – α - β -anomers; bXg-bYg series – β - β -anomers

серия aXg-aYg					
aXg\aYg	1g	2g	3g	4g	6g
1g	14,5	14,6	14,4	85,0	-69,2
2g		47,7	7,3	9,8	-42,3
3g			54,4	22,4	-40,2
4g				48,4	-43,9
6g					-80,1
серия aXg-bYg					
aXg\bYg	1g	2g	3g	4g	6g
1g	-1,3	29,1	-21,9	4,2	-65,0
2g	15,7	3,5	7,2	39,3	-13,0
3g	7,9	34,2	15,1	39,0	-34,8
4g	-18,1	67,6	7,7	1,4	-47,3
6g	-53,5	-11,7	10,4	-52,0	-83,8
серия bXg-bYg					
bXg\bYg	1g	2g	3g	4g	6g
1g	-40,1	6,5	-16,1	-21,0	-61,8
2g		19,4	49,2	4,3	-39,9
3g			101,5	40,3	-36,4
4g				-21,1	-29,6
6g					-70,8

Таблица 2. Энергия системы дисахаридов β -D-глюкопиранозы и α -L-рамнопиранозы, серия bXg-aYr, кДж/моль

Table 2. Energy of the system of disaccharides β -D-glucopyranose and α -L-rhamnopyranose, bXg-aYr series, kJ/mol

серия bXg-aYr				
bXg\aYr	1r	2r	3r	4r
1g	35,0	51,5	88,5	67,2
2g	127,6	128,9	87,5	88,7
3g	121,3	65,0	114,3	70,1
4g	63,0	46,2	106,9	132,3
6g	12,8	23,9	32,1	37,1

Можно разбить интервал значений ΔE на три группы. К первой группе отнесем изменение энергии системы (реакции) $\Delta E > 20$ кДж/моль, когда реакция образования дисахарида будет маловероятной. Во второй группе значение энергии связывания системы ΔE находится в интервале 0-20 кДж/моль. Это позволяет проводить реакцию подбором условий (растворитель, температура и т.д.). Можно обозначить соединения этой группы разрешенными. Значения $\Delta E < 0$ приводят к самопроизвольному протеканию реакции. Рассматриваемые дисахариды с такими значениями энергии связывания принадлежат к третьей группе.

В литературе, посвященной строению углеводов, чаще всего рассматриваются структуры природных дисахаридов, содержащих гликозидную связь. В нашей нотификации для таких структур одна из цифр X или Y будет иметь значение 1. Мы не ограничены рассмотрением только природных структур и можем рассматривать также маловероятные и разрешенные.

Анализируя результаты моделирования, отметим следующее.

Трегалоза (a1g-a1g, в нашей нотификации) принадлежит ко второй группе, изменение потенциальной энергии реакции $\Delta E = 14$ кДж/моль. Как и в других сериях, трегалоза не является единственным разрешенным дисахаридом в группе. Бета-мальтоза (a1g-b4g), $\Delta E = 4$ кДж/моль, также принадлежит ко второй группе. В наших условиях моделирования, альфа-мальтоза получилась маловероятной (первая группа), $\Delta E = 84$ кДж/моль.

У дисахарида целлобиозы оба аномера принадлежат к третьей группе. Такой результат неплохо согласуется с положением о широком распространении полисахарида целлюлозы, как продукта дальнейшего роста цепи целлобиозы.

Результаты моделирования показывают, что самопроизвольное ($\Delta E < 0$) протекание реакции при образовании дисахаридов из глюкозы и рамнозы маловероятно. Соединение b6g-a1r, которое можно рассматривать как рутинозу, обладает одним из полученных низких, но положительных, $\Delta E > 0$, значений (вторая группа). Последнее согласуется с положением, почему дисахарид рутинозу чаще получают не синтезом из моносахаридов, а гидролизом сложного гликозида рутина. Тем не менее, в этой серии есть не только разрешенные дисаха-

риды (вторая группа), но и комбинации третьей группы.

Таким образом, при моделировании дисахаридных структур можно выделить энергетически выгодные варианты связывания моносахаридов через 1-, 4-, 6- гидроксильные группы D-глюкопиранозы и 1-, 2-, 4-гидроксигрупп L-рамнопиранозы.

Остовная часть пиранозного кольца представлена, в том числе, атомами углерода C3 и C4. Наименее энергетически выгодные структуры – со связью через гидроксильную группу атома углерода C3 обоих моносахаридов. В межуглеводном взаимодействии и образовании олиго- и полисахаридов местоположение C4 глюкопиранозы играет важную роль – через него происходит образование линейной полимерной цепи целлюлозы. При этом образующийся дисахарид целлобиоза имеет определенную структуру, когда два моносахаридных остатка оказываются закрепленными в развернутом друг относительно друга положении. Вращательный переход этих колец в другие положения имеет высокой энергетический барьер, сравнимый с энергией разрыва связи «моносахарид-моносахарид» [9]. Из Табл.1 видно, что связывание моносахаридных остатков через гидроксильные группы остовой части выгодно для определенных комбинаций дисахаридов, значения энергии системы находятся в интервале -50-0 кДж/моль.

Обращает на себя внимание положение гидроксигруппы при атоме углерода C6 глюкопиранозы. Эта гидроксильная группировка является первично-спиртовой, для нее в органической химии отмечается высокая реакционная способность. Связывание через гидроксигруппу C6 также энергетически выгодно, но в природных соединениях не является преобладающим. Обычно, в олиго- и полисахаридах связь моносахаридных компонентов по положению 6 отмечается при образовании пространственных структур («сшивка» цепочек), например, крахмальных (амилопектин).

Ранее в [6] было проведено моделирование структур гликозидов кверцетина и рассматриваемых моносахаридов. Связывание «кверцетин-моносахарид» происходило через гидроксильные группы при атомах углерода 1, 6- D-глюкопиранозы и 1-, 2-, 4- L-рамнопиранозы. Точка связывания C4 глюкопиранозы в комплексах с кверцетином обладала малым значением энергии системы и, в рамках нынешней

работы, относилась ко второй группе вероятности реакции. Сам факт уменьшения вероятности взаимодействия можно объяснить большим объемом и усложнением структуры самой молекулы кверцетина по сравнению с моносахаридом.

Сравнивая значения энергии системы образующихся гликозидов кверцетина и дисахаридов, отметим следующее. Численные значения ΔE системы при образовании разрешенных гликозидов кверцетина находятся в интервале $-20-0$ кДж/моль. При образовании дисахаридов из одинаковых мономерных остатков по маршруту взаимодействия остовного пиранозного кольца, изменение энергии системы имеет такой же порядок величины для β -D-глюкопиранозы и энергетически невыгодно для α -аномера. Из этого следует, что прямое взаимодействие кверцетина с β -D-глюкопиранозой в условиях затрудненного равновесия альфа- и бета-аномеров, например при твердофазном механохимическом взаимодействии, может приводить как к образованию целевого продукта гликозида кверцетина, так и к появлению побочного продукта дисахарида β -пиранозы. Т.е., эти реакции могут быть параллельными.

Выводы

1. Методом молекулярной механики проведено моделирование структур дисахаридов, образованных углеводами D-глюкопиранозой и L-рамнопиранозой.

2. По параметру «потенциальная энергия» определены наиболее вероятные структуры, которые могут образовываться при прямом взаимодействии моносахаридов. В этом случае изменение потенциальной энергии $\Delta E < 0$. Среди рассматриваемых структур такими дисахаридами являются, например, аномеры целлобиозы. Рассматриваемые изменения потенциальной энергии (энергии связывания) представляют собой термодинамические параметры.

3. Приведены сравнительные оценки реакционной способности различных положений гидроксигрупп углеводов: наиболее реакционноспособными являются 1-, 4-, 6-гидроксильные группы D-глюкопиранозы и 1-, 2-, 4-гидроксигрупп L-рамнопиранозы.

4. Сравнение энергий связывания в реакциях «кверцетин-глюкоза» и «глюкоза-глюкоза» позволяет сделать вывод о возможном параллельном протекании названных реакций в ус-

ловиях прямого реагирования, например, при механохимическом взаимодействии.

Список литературы

1. Корулькин Д.Ю., Абилов Ж.А., Музычкина Р.А., Толстиков Г.А. Природные флавоноиды. Новосибирск: Академическое изд-во ГЕО, 2007. 232 с.
2. Lomovsky O., Lomovsky I. Mechanochemically assisted extraction, in Enhancing Extraction Processes in the Food Industry / Eds Lebovka N., Vorobiev E., Chemat F. London – NY. 2012. P. 361–385.
3. Lomovsky O.I., Lomovskiy I.O., Orlov D.V. Mechanochemical solid acid/base reactions for obtaining biologically active preparations and extracting plant materials // Green Chemistry Letters and Reviews. 2017. V. 10, N. 4. P. 171–185.
4. Дудкин В.С., Громов Н.А., Ведерников Р.Г., Каткевич, Черно Н.К.. Гемицеллюлозы. Рига: Зинатне, 1991. 488 с.
5. Orlov D.V., Lomovsky O.I., Lomovsky I.O. The first solid state glycosylation of quercetin // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2017. 292. 012036.
6. Мамылов С.Г., Ломовский О.И. Моделирование энергии связывания в гликозидах кверцетина и аномера D-глюкопиранозы или L-рамнопиранозы // Химия в интересах устойчивого развития. 2019. Т. 27, С. 313–316.
7. Hassinen T., Peräkylä M. New energy terms for reduced protein models implemented in an Off-Lattice force field // J. Comput. Chem. NY. 2001. V. 22, Is. 12. P. 1229–1242.
8. Бочков А.Ф., Афанасьев В.А., Заиков Г.Е. Углеводы. М.: Наука, 1980. 176 с.
9. Мамылов С.Г. Моделирование энергии состояния целлобиозного звена. Механохимическое воздействие // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2020. Т. 17, №4. С. 443–448.

Информация об авторах

С. Г. Мамылов – кандидат химических наук, научный сотрудник Института химии твердого тела и механохимии СО РАН.

О. И. Ломовский – доктор химических наук, главный научный сотрудник Института химии твердого тела и механохимии СО РАН.

References

1. Korulkin, D. Yu., Abilov, Zh. A., Muzychkina, R. A. & Tolstikov, G. A. (2007). Natural flavonoids. Novosibirsk: Akademicheskoye izd-vo GEO. P. 232. (In Russ.).
2. Lomovsky, O. & Lomovsky, I. (2012). Mechanochemically assisted extraction, in Enhancing Extraction Processes in the Food Industry. Eds Lebovka N., Vorobiev E., Chemat F. London – NY. P. 361–385.
3. Lomovsky, O. I., Lomovskiy, I. O. & Orlov, D. V. (2017). Mechanochemical solid acid/base reactions for obtaining biologically active preparations and extracting plant materials. *Green Chemistry Letters and Reviews*, 4(10), 171–185.
4. Dudkin, V. S. Gromov, N. A. Vedernikov, Katkevich, R. G. & Chernov, N. K. (1991). *Gemitsellyulozy*. Riga: Zinatne. P. 488. (In Russ.).
5. Orlov, D. V., Lomovsky, O. I. & Lomovsky, I. O. (2017). The first solid state glycosylation of quercetin. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 292, 012036.
6. Mamylov, S. G. & Lomovsky, O. I. (2019). Modeling the binding energy in glycosides of quercetin and the anomer of D-glucopyranose or L-rhamnopyranose. *Khimiya v interesakh ustoychivogo razvitiya*, (27), 313–316. (In Russ.).
7. Hassinen, T. & Peräkylä, M. (2001). New energy terms for reduced protein models implemented in an off-lattice force field. *J. Comput. Chem. NY*, 12(22), 1229–1242.
8. Bochkov A.F., Afanasiev V.A., Zaikov G.E. (1980). Carbohydrates. M.: Nauka. P. 176. (In Russ.).
9. Mamylov, S. G. (2020). Simulation of the energy of the state of the cellobiose unit. Mechanochemical impact. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 4(17), 443–448. (In Russ.).

Information about the authors

S. G. Mamylov – Candidate of Chemical Sciences, Researcher, Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS.

O. I. Lomovsky – Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher, Institute of Solid State Chemistry and Mechanochemistry SB RAS.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 17.01.2022; одобрена после рецензирования 27.01.2022; принята к публикации 08.02.2022.

The article was received by the editorial board on 17 Jan. 22; approved after reviewing 27 Jan. 22; accepted for publication 08 Feb. 22.