

Yang Yi

Kwantowo-chemiczne badania wybranych związków stanowiących aktywne komponenty w tradycyjnej medycynie chińskiej

Tradycyjna Medycyna Chińska (ang. traditional Chinese medicine, TCM) oparta jest na ponad 2500 latach praktyki medycznej w Chinach i zawiera między innymi farmakognozę, akupunkturę, masaż i inne. Współcześnie widoczne są również wpływy na nią współczesnej medycyny zachodniej. Obecnie, w Chinach, powodu smogu oraz poważnego zanieczyszczenia powietrza obserwuje się wyraźny wzrost zachorowań na przewlekłą, obturacyjną chorobę płuc (POCP) (łac. morbus obturativus pulmonum chronicum). Szczególnie groźne są cząstki będące w grupie $PM_{2,5}$. W leczeniu klinicznym antyoksydanty z tradycyjnych chińskich medykamentów są używane dla pacjentów POCP, aby zapobiegały zmianom patofizjologicznym i uważa się, że, lecznicze efekty leków ziołowych spowodowane są aktywnością antyoksydacyjną wykazywaną przez flawonoidy, saponiny, polisacharydy, kwasy organiczne, terpeny i inne. Jednakże związki aktywne i związane z nimi mechanizmy farmakologiczne nie są wystarczająco przebadane.

W prezentowanej pracy badano dwie chińskie rośliny: rabarbar dłoniasty (*Rheum palmatum*) oraz korzeń opornika (*Radix puerariae*). Przeprowadzone badania teoretyczne właściwości chemicznych takich jak struktura molekularna i termodynamika cząsteczek, ich pochodnych rodników i stanów przejściowych, rozkład ładunków i elektronowa gęstość spinowa gęstość (tam gdzie pojęcie ma zastosowanie), struktura orbitali molekularnych oraz widma wibracyjne. Uzyskane dane zostały wykorzystane do badania właściwości antyrodnikowych aktywnych składników badanych roślin. Wyniki potwierdziły oczekiwania oraz dodały informacji na temat mechanizmów wychwytywania rodników. Dodatkowo wykonano badania eksperymentalne 1H i ^{13}C NMR właściwości widm dla emodinu (składnika rabarbaru) oraz puarinu i daidzeinu (składników opornika). Interpretacja otrzymanych widm została wzmocniona obliczeniami kwantowo-chemicznymi. Wykonano również wstępne badania kompleksów powstałych przez interkalację cząsteczek aktywnych składników fragmentami DNA w celu badania ich możliwych właściwości antynowotworowych. Większość prezentowanych badań teoretycznych jest oparta o metodologię teorii funkcjonału gęstości. Interpretacja wyników eksperymentalnych NMR bazuje na oryginalnym podejściu opracowanym przez współbadaczy.