

JOTCSA, volume 2, issue 2, 2015



TURKISH CHEMICAL SOCIETY
Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry

Owned by the Turkish Chemical Society

Correspondence e-mail: jotcsa@turchemsoc.org

Founded in February, 2014

DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF FORMLY CHROMONE SCHIFF BASES

FORMIL KROMON SCHIFF BAZLARININ ANTIÖKSİDAN AKTİVİTELERİNİN DFT ÇALIŞMASI

Dilara ÖZBAKIR IŞIN^{1*}

¹Cumhuriyet University Department of Chemistry, Faculty of Science, Sivas, 58140, Turkey

*Corresponding author. dozbakir@cumhuriyet.edu.tr

ABSTRACT

Antioxidant compounds in food play an important role as health-protecting factors. Scientific evidence suggests that antioxidants can reduce the risk for chronic diseases including cancer and heart disease. The main characteristic of an antioxidant is its ability to trap free radicals. Highly reactive free radicals and oxygen species are present in biological systems from a wide variety of sources. These free radicals may oxidize nucleic acids, proteins, lipids or DNA and can initiate degenerative disease. Antioxidant compounds scavenge free radicals such as peroxides, hydroperoxides or lipid peroxy and thus inhibit the oxidative mechanisms that lead to degenerative diseases.

Chromone derivatives are abundant in nature and exhibit a wide range of pharmacological activity like anti-bacterial, anti-fungal, anti-cancer, anti-oxidant, anti-HIV, anti-ulcers [1,2]. Schiff bases of 3-formyl chromone also have a variety of applications in biological, clinical and pharmacological areas [3,4]. In this work, 3-((3-hydroxypyridin-2-ylimino)methyl)-4H-chromen-4-one (I) and 3-(-(2-mercaptophenylimino)methyl)-4H-chromen-4-one (II)[5] are chosen to investigate the capacity of their antioxidant activity. In order to explain the antioxidant performance of these compounds, the BDE and electronic properties such as HOMO and LUMO energies, IP, hardness and softness were computed and in detail.

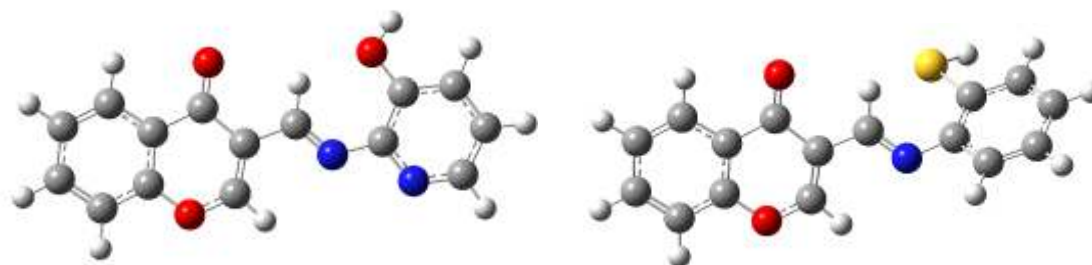


Figure 1: Structures of I and II.

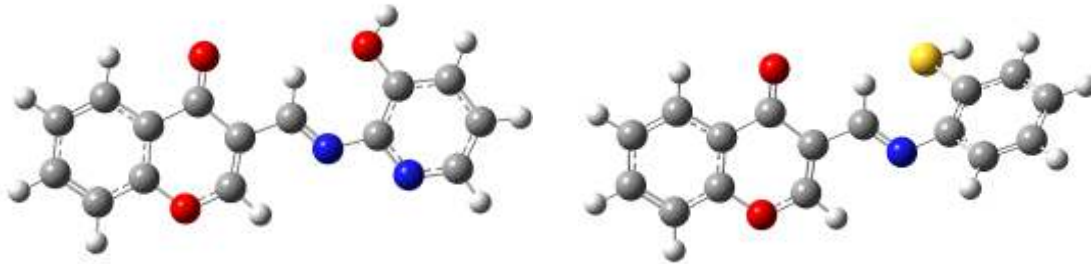
Keywords

Antioxidant, Formly Chromone Schiff Bases, Density Functional Theory.

ÖZET

Besinlerdeki antioksidan bileşikler, sağlığı koruyucu unsurlar olarak önemli rol oynarlar. Bilimsel kanıtlar, antioksidanların kanser ve kalp hastalıkları gibi kronik hastalıklar için riski azaltabildiklerini göstermektedir. Bir antioksidanın temel özelliği, serbest radikalleri yakalama yeteneğidir. Biyolojik sistemlerde çok reaktif serbest radikaller ve oksijen türleri bulunmaktadır. Bu serbest radikaller, nükleik asitleri proteinleri, lipitleri ya da DNA yapısını okside edebilir ve dejeneratif hastalığı başlatabilirler. Antioksidan bileşikler, peroksitler, hidroperoksitler ve lipit peroksiller gibi serbest radikalleri yakalar ve böylece dejeneratif hastalıklara yol açan oksidatif mekanizmaları inhibe ederler.

Kromon türevleri doğada bol miktarda bulunurlar ve antibakteriyel, antifungal, antikanser, antioksidan, anti-HIV ve anti-ülser gibi pek çok farmakolojik aktiviteye sahiptirler [1,2]. 3-Formilkromonun Schiff bazları da biyolojik, klinik ve farmakolojik olarak çeşitli uygulama alanlarına sahiptir [3,4]. Bu çalışmada, 3-((3-hidroksipiridin-2-ilamino) metil) -4H-kromen-4-on (I) ve 3-(-(2-mercaptofenilimino) metil)-4H-kromen-4-on (II) [5] bileşikleri antioksidan kapasitelerini incelemek için seçildi. Bu amaç için, BDE ve HOMO, LUMO, IP, sertlik, yumuşaklık gibi elektronik özellikleri ayrıntılı olarak hesaplanmıştır.



Şekil 1: I ve II yapıları.

Anahtar Kelimeler

Antioksidan, Formil kromon Schiff bazları, DFT.

Kaynaklar / References

- [1] S. Martens, A. Mithöfer, *Phytochemistry* 66, 2399-2407, 2005.
- [2] M. Kuroda, S. Uchida, K. Watanabe, K. Mimaki, *Phytochemistry* 70, 288-293, 2009.
- [3] K.M. Khan, N. Ambreen, U.R. Mughal, S. Jalil, S. Perveen, M.I. Choudhary, *Eur. J. Med. Chem.* 45, 4058-4064, 2010.
- [4] K.M. Khan, N. Ambreen, S. Hussain, S. Perveen, M.I. Choudhary, *Bioorg. Med. Chem.* 17, 2983-2988, 2009.
- [5] P. Kavitha, M. Saritha, K. Laxma Reddy, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* 102, 159-168, 2013.