

**Полная исследовательская публикация** \_\_\_\_\_ Тематический раздел: Квантовая химия.  
Регистрационный код публикации: 7-12-6-26 Подраздел: Элементоорганическая химия.  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей  
интернет-конференции “Новые методы синтеза, строение и применение  
элементоорганических соединений”. <http://butlerov.com/synthesys/>  
УДК 539.1.07:577.127.4.33:547.972.35. Поступила в редакцию 1 декабря 2007 г.

## **Исследование молекулярного механизма взаимодействия 5,7,3',4'-тетраоксифлавои-3-рутинозида и 3,5,7,3',4' пентаоксифлавонола с фосфатидилхолином**

© Сетченков Михаил Сергеевич, Усманова Светлана Ильдаровна,  
Афанасьева Юлия Геннадьевна и Насибуллин Руслан Сагитович\*<sup>†</sup>

*Кафедра медицинской физики. Башкирский государственный медицинский университет.*

*Ул. В.И. Ленина, 3. г. Уфа, 450000. Республика Башкортостан. Россия.*

*Тел.: (347) 273-61-83. E-mail: med-fis@yandex.ru*

---

\*Ведущий направление; <sup>†</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** *комплексобразование, квантово-химические расчеты, методы <sup>31</sup>P и <sup>13</sup>C ЯМР спектроскопии, химический сдвиг.*

### **Аннотация**

Исследован молекулярный механизм комплексобразования некоторых флавоноидов с фосфатидилхолином. Полуэмпирическим методом квантовой химии AM1 и методом функционала плотности (DFT) исследованы основные структурные параметры и электронное строение взаимодействующих молекул и комплексов, а также энергии комплексобразования.