

# SỰ KẾT HỢP GIỮA NGHIÊN CỨU THỰC NGHIỆM VÀ TÍNH TOÁN HÓA LÝ THUYẾT TRONG VIỆC KHẢO SÁT TIỀM NĂNG CHỐNG OXI HÓA CỦA GALLIC ACID

Đinh Quý Hương\*

Khoa Hóa, Trường Đại học Sư Phạm, Đại học Huế, 34 Lê Lợi, Huế, Việt Nam

\* Tác giả liên hệ Đinh Quý Hương <dinhhquyhuong@dhsphue.edu.vn>  
(Ngày nhận bài: 07-08-2022; Ngày chấp nhận đăng: 10-11-2022)

**Tóm tắt.** Khả năng chống oxy hóa của 3,4,5-trihydroxybenzoic acid (gallic acid) đã được nghiên cứu bằng các phương pháp phổ, gồm 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH<sup>•</sup>), 2,2'-azinobis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonate) (ABTS<sup>•+</sup>), phosphomolybdenum và các tính toán hóa lượng tử ở mức lý thuyết  $\omega$ -B97XD/6-311++G(d,p). Kết quả cho thấy gallic acid có khả năng bắt gốc tự do DPPH<sup>•</sup> và ABTS<sup>•+</sup> mạnh hơn trolox với các giá trị IC<sub>50</sub><sup>DPPH</sup> và IC<sub>50</sub><sup>ABTS</sup> là  $2,23 \pm 0,02$  và  $12,20 \pm 0,03$   $\mu$ M. Trong phương pháp phosphomolybdenum, gallic acid có khả năng khử Mo(VI) về Mo(V) tương đương với trolox. Cơ chế phản ứng giữa gallic acid và HOO<sup>•</sup> theo tính toán hóa lượng tử chủ yếu là chuyển nguyên tử hydro.

**Từ khóa:** gallic acid, tính toán hóa lượng tử, cơ chế phản ứng, chống oxy hóa

## A combination of experimental research and computational chemistry in investigating antioxidant potential of gallic acid

Đinh Quý Hương\*

Department of Chemistry, University of Education, Hue University, 34 Le Loi St., Hue, Vietnam

\* Correspondence to Dinh Quy Huong <dinhhquyhuong@dhsphue.edu.vn>  
(Received: 07 August 2022; Accepted: 10 November 2022)

**Abstract.** The antioxidant capacity of 3,4,5-trihydroxybenzoic acid (gallic acid) was investigated with spectroscopic methods, including 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH<sup>•</sup>), 2,2'-azinobis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonate) (ABTS<sup>•+</sup>), and phosphomolybdenum and quantum chemical calculations at the theoretical level of  $\omega$ -B97XD/6-311++G(d,p). The results show that gallic acid had stronger DPPH<sup>•</sup> and ABTS<sup>•+</sup> free radical scavenging ability than trolox with IC<sub>50</sub><sup>DPPH</sup> and IC<sub>50</sub><sup>ABTS</sup> values of  $2.23 \pm 0.02$  and  $12.20 \pm 0.03$   $\mu$ M. In the phosphomolybdenum method, Mo(VI) to Mo(V) reducing ability of gallic acid was equivalent to that of trolox. According to quantum research results, the reaction mechanism between gallic acid and HOO<sup>•</sup> is primarily the hydrogen atom transfer.

**Keywords:** gallic acid, quantum chemical calculation, reaction mechanism, antioxidant

## 1 Đặt vấn đề

3,4,5-Trihydroxybenzoic acid (gallic acid-GAH) – một hợp chất triphenol khối lượng phân tử thấp có trong tự nhiên – được cho là có các hoạt động chống oxy hóa mạnh trong nhiều nghiên cứu [1]. Năm 2002, Kim và cs. đã nghiên cứu khả năng chống oxy hóa quy tương đương của các hợp chất phenol [2]. Kết quả cho thấy gallic acid có khả năng chống oxy hóa vượt trội hơn quercetin, catechin, vitamin C, rutin, epicatechin, chlorogenic acid và Trolox. Một nghiên cứu khác của Schlesier [3] cho thấy gallic acid cũng là chất chống oxy hóa mạnh khi so sánh với uric acid, Trolox và ascorbic acid. Sáu phương pháp được sử dụng bao gồm thử nghiệm khả năng chống oxy hóa tương đương Trolox (TEAC I-III), thử nghiệm thông số chống oxy hóa bẫy gốc tự do (TRAP), thử nghiệm 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH), thử nghiệm N,N-dimethyl-p-phenylendiamine (DMPD), thử nghiệm hóa phát quang (PCL) và khả năng khử Ferric của thử nghiệm huyết tương (FRAP). Tất cả các phương pháp đều cho thấy gallic acid là chất chống oxy hóa mạnh nhất, ngoại trừ DMPD.

Rõ ràng, gallic acid là hợp chất được dự đoán có nhiều ưu điểm vượt trội về khả năng bắt gốc tự do và chống oxy hóa. Tuy vậy, cho đến nay, việc kết hợp các nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết để làm rõ cơ chế phản ứng của gallic acid vẫn chưa được thực hiện. Vì vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi tập trung thử nghiệm khả năng chống oxy hóa của nó qua ba phương pháp thực nghiệm bao gồm phương pháp 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH), phương pháp phosphomolybdenum (PM) và phương pháp 2,2'-azinobis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonate) (ABTS). Trolox là một chất chống oxy hóa điển hình; vì vậy, nó được sử dụng để so sánh với gallic acid trong cùng điều kiện nghiên cứu.

Nghiên cứu về mặt hóa lý thuyết được tiến hành nhằm làm rõ cơ chế phản ứng giữa gallic acid và gốc tự do. Mức lý thuyết ω-B97XD/6-

311++G(d,p) được lựa chọn để tối ưu hóa cấu trúc phân tử và khảo sát các cơ chế phản ứng. Đây là một trong các phương pháp lý thuyết cho kết quả nghiên cứu khá chính xác khi tính các thông số nhiệt hóa học và động học [4].

## 2 Thực nghiệm

### 2.1 Hóa chất

3,4,5-Trihydroxybenzoic acid (gallic acid), 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH), ethanol, potassium persulfate ( $K_2S_2O_8$ ), 6-hydroxy-2,5,7,8-tetramethylchroman-2-carboxylic acid (Trolox), ammonium molybdate tetrahydrate ( $(NH_4)_6Mo_7O_{24} \cdot 4H_2O$ ), 2,2'-azinobis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid) diammonium (ABTS), sodium dihydrogen phosphate dihydrate ( $NaH_2PO_4 \cdot 2H_2O$ ) và sulfuric acid ( $H_2SO_4$ ) đều được đặt mua ở Sigma-Aldrich.

### 2.2 Thực nghiệm phương pháp DPPH•

Đầu tiên, dung dịch DPPH được điều chế ở nồng độ 0,067 mM trong ethanol. Gallic acid được pha ở các nồng độ khác nhau từ 0,5 đến 3  $\mu$ M. Mẫu trắng là hỗn hợp gồm 1 mL dung dịch DPPH và 3 mL ethanol. Mẫu khảo sát là hỗn hợp gồm 1 mL dung dịch DPPH và 3 mL dung dịch gallic acid. Các mẫu được trộn đều, ủ trong bóng tối 30 phút và đo mật độ quang ở 515 nm. Hiệu suất bắt gốc tự do DPPH• của chất chống oxy hóa ( $SE_{DPPH\bullet}$ ) được tính theo công thức (1) [5].

$$SE_{DPPH\bullet} \% = \frac{A_c - A_s}{A_c} \cdot 100 \quad (1)$$

trong đó  $A_c$  và  $A_s$  là mật độ quang của mẫu trắng và mẫu khảo sát.

### 2.3 Thực nghiệm phương pháp ABTS•+

Dung dịch ABTS 7 mM và  $K_2S_2O_8$  2,45 mM được trộn với nhau và ủ trong bóng tối trong 16 giờ tạo ra cation gốc tự do ABTS•+ (dung dịch có màu xanh lục đậm). Ethanol được sử dụng để pha loãng dung dịch ABTS để có giá trị mật độ quang  $0,7 \pm$

0,05 ở bước sóng 734 nm. Trộn 1 mL ethanol với 3 mL dung dịch ABTS để tạo mẫu trắng; mẫu khảo sát gồm 1 mL gallic acid và 3 mL dung dịch ABTS. Trong thí nghiệm này, gallic acid được pha loãng trong ethanol ở các nồng độ từ 5 đến 20  $\mu\text{M}$ . Các thí nghiệm được lặp lại ba lần. Hiệu suất bắt gốc tự do ABTS $^{\bullet+}$  ( $SE_{\text{ABTS}^{\bullet+}}$  %) được tính theo công thức (2).

$$SE_{\text{ABTS}^{\bullet+}} \% = \frac{A_c - A_s}{A_c} \cdot 100 \quad (2)$$

trong đó  $A_c$  và  $A_s$  là mật độ quang của mẫu trắng và mẫu khảo sát trong thí nghiệm với ABTS $^{\bullet+}$

## 2.4 Thực nghiệm phương pháp phosphomolybdenum (PM)

Tổng khả năng chống oxy hóa của gallic acid được thực hiện theo quy trình của Prieto với một số điều chỉnh [6]. Thuốc thử là hỗn hợp dung dịch sulfuric acid 0,6 M, sodium dihydrogen phosphate 28 mM và ammonium molybdate 4 mM. Lấy 0,3 mL dung dịch chất chống oxy hóa ở các nồng độ khác nhau trộn với 3 mL dung dịch thuốc thử, đậy nắp và ủ hỗn hợp ở 95 °C trong 90 phút. Sau đó, tất cả các mẫu được để nguội đến nhiệt độ phòng. Độ hấp thụ của mẫu được đo ở bước sóng 695 nm bằng máy quang phổ TCC-240A SHIMAZU UV/Vis. Mẫu trắng chứa 3 mL dung dịch thuốc thử và 0,3 mL ethanol. Tổng khả năng chống oxy hóa của gallic acid được biểu thị dưới dạng quy tương đương Trolox.

## 3 Nghiên cứu hóa lý thuyết

Phần mềm Gaussian 16 được sử dụng để thực hiện các tính toán hóa lượng tử. Cơ chế chuyển nguyên tử hydro (HAT) [7, 8], và cơ chế phản ứng cộng (RAF) [9, 10] là những cơ chế phản ứng thường sử dụng để nghiên cứu các phản ứng của hợp chất polyphenol. Vì vậy, chúng được lựa chọn để khảo sát phản ứng giữa gallic acid và gốc tự do HOO $^{\bullet}$  trong nghiên cứu này. Chi tiết về cơ chế phản ứng và cách tính hằng số tốc độ phản ứng

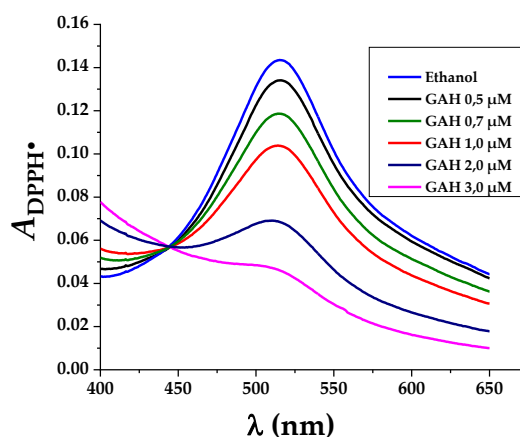
được trình bày ở Bảng S1.

## 4 Kết quả và thảo luận

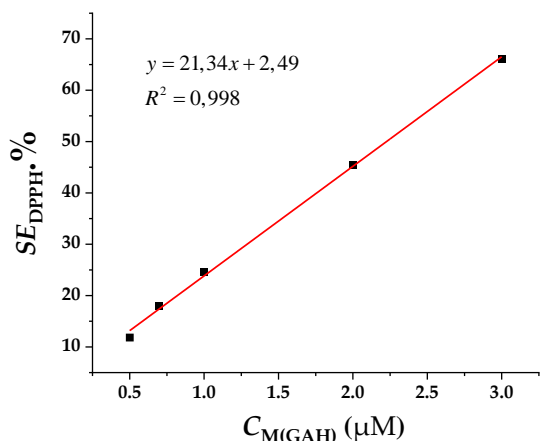
### 4.1 Phương pháp DPPH $^{\bullet}$

Hình 1 là phổ tử ngoại khả kiến của DPPH $^{\bullet}$  ở các nồng độ khác nhau của gallic acid. Khi nồng độ gallic acid tăng lên, đỉnh hấp thụ của phổ có chiều hướng đi xuống, cho thấy lượng DPPH trong dung dịch giảm dần. Hiệu suất bắt gốc tự do DPPH $^{\bullet}$  của gallic acid được tính dựa vào công thức (1). Cụ thể, khi nồng độ gallic acid là 0,5  $\mu\text{M}$  thì hiệu suất bắt gốc của gallic acid là 11,84% và giá trị này tăng lên 66,09% khi nồng độ của nó là 3  $\mu\text{M}$ . Điều này chứng tỏ gallic acid đã phản ứng với gốc tự do DPPH $^{\bullet}$  (dung dịch có màu tím) tạo thành DPPHH, làm dung dịch thu được có màu vàng nhạt [11].

Để tính giá trị IC<sub>50</sub>DPPH của gallic acid, chúng tôi xây dựng đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nồng độ của gallic acid và hiệu suất bắt gốc DPPH $^{\bullet}$  [12]. Đồ thị thu được có dạng  $y = 21,34 \times x + 2,49$  với giá trị hệ số tương quan là 0,998. Từ đó, IC<sub>50</sub>DPPH của gallic acid được tính và có giá trị là  $2,23 \pm 0,02$   $\mu\text{M}$ . Bằng phương pháp tương tự, IC<sub>50</sub>DPPH của Trolox là  $4,87 \pm 0,02$   $\mu\text{M}$ . Kết quả này chứng tỏ gallic acid có khả năng bắt gốc tự do DPPH $^{\bullet}$  gấp hai lần so với Trolox.



Hình 1. Phổ tử ngoại khả kiến của DPPH $^{\bullet}$  trong các thí nghiệm với gallic acid

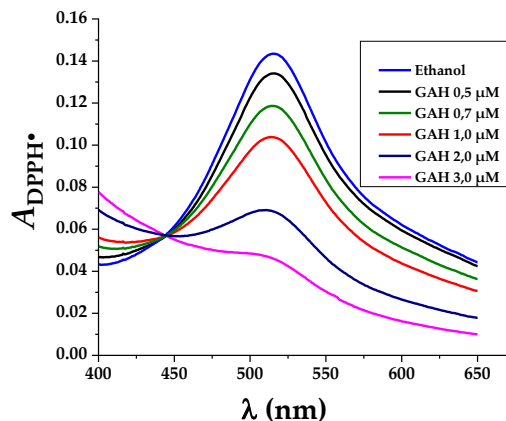


Hình 2. Mối quan hệ giữa nồng độ gallic acid và hiệu suất bắt gốc DPPH•

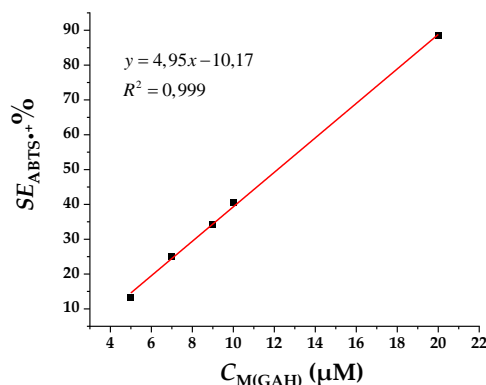
#### 4.2 Phương pháp ABTS•+

Tương tự phương pháp DPPH•, độ hấp thụ của dung dịch ABTS ở các nồng độ khác nhau của gallic acid được khảo sát ở bước sóng 734 nm. Khi nồng độ gallic acid tăng lên, đỉnh của phổ tử ngoại khả kiến của hỗn hợp phản ứng cũng giảm xuống. Điều này chứng tỏ gallic acid đã trung hòa cation gốc tự do ABTS•+ trong dung dịch, làm màu xanh của dung dịch chuyển dần sang không màu [13, 14].

Hiệu suất trung hòa cation gốc tự do ABTS•+ của gallic acid được tính theo công thức (2). Kết quả cho thấy khi nồng độ của gallic acid tăng từ 5 lên 20 μM, hiệu suất phản ứng tăng lên từ 11,41 đến 88,37%. Mối quan hệ giữa nồng độ gallic acid và hiệu suất bắt gốc ABTS•+ của nó cũng biểu diễn bằng phương trình  $y = 4,95 \times x - 10,17$  ở Hình 4. Hệ số tương quan ( $R^2 = 0,999$ ) cho thấy mối tương quan chặt chẽ giữa hai đại lượng này. Từ phương trình trên, chúng tôi tính giá trị  $IC_{50_{ABTS}}$  của gallic acid là  $12,2 \pm 0,03 \mu M$ . Trong khi đó, giá trị này của Trolox là  $29,39 \pm 0,01 \mu M$  khi khảo sát ở cùng điều kiện. Điều này chứng tỏ gallic acid có khả năng trung hòa cation gốc tự do ABTS•+ tốt hơn Trolox.



Hình 3. Phổ tử ngoại khả kiến của ABTS•+ trong thí nghiệm với gallic acid



Hình 4. Mối quan hệ giữa nồng độ của gallic acid và hiệu suất bắt gốc ABTS•+

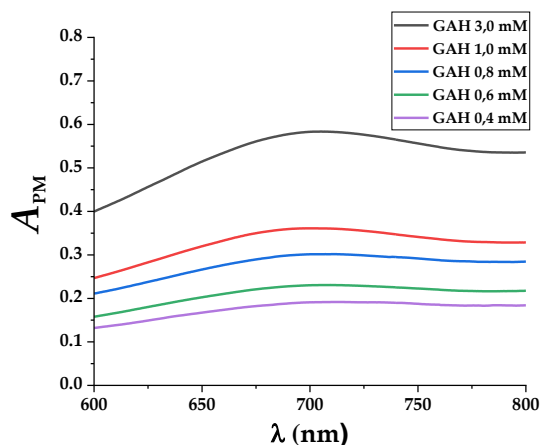
#### 4.3 Phương pháp phosphomolybdenum

Tổng khả năng chống oxy hóa của gallic acid có thể được đánh giá bằng phương pháp phosphomolybdenum. Nguyên tắc cơ bản của phương pháp này là đánh giá khả năng khử Mo(VI) thành Mo(V) bằng các chất chống oxy hóa. Chất chống oxy hóa cho điện tử càng mạnh thì Mo (VI) càng dễ dàng nhận điện tử để tạo thành phức chất phosphomolybdate (V) màu xanh lục trong dung dịch có tính acid.

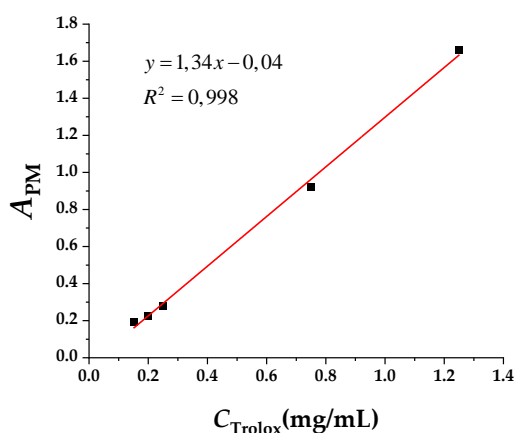
Ở Hình 5, độ hấp thụ của dung dịch tăng lên ở bước sóng 695 nm khi nồng độ của chất chống oxy hóa tăng lên. Điều này cho thấy lượng Mo(V) tạo ra tăng lên khi nồng độ gallic acid tăng. Sodium dihydrogen phosphate phản ứng với ammonium

molybdate trong môi trường acid tạo thành dung dịch màu vàng  $H_3PO_4(Mo^{VI}O_3)_{12}$  [15]. Sau đó, dung dịch này bị gallic acid khử, tạo thành  $[H_4PMo_8^{VI}Mo_4^{VO}_{40}]^{3-}$  (màu xanh lục).

Hoạt tính chống oxy hóa của gallic acid được biểu thị bằng số mg tương đương Trolox. Hình 6 là đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa mật độ quang và nồng độ của Trolox ( $y = 1,34 \times x - 0,04$ ). Từ phương trình này, chúng tôi tính được số mg Trolox quy tương đương cho gallic acid là 1,02 mg/mg. Điều này chứng tỏ tổng khả năng chống oxy hóa của gallic acid tương đương Trolox. Khả năng cho điện tử của gallic acid và Trolox trong thí nghiệm này là tương đương nhau.



Hình 5. Phổ tử ngoại khả kiến của gallic acid trong thí nghiệm phosphomolybdenum



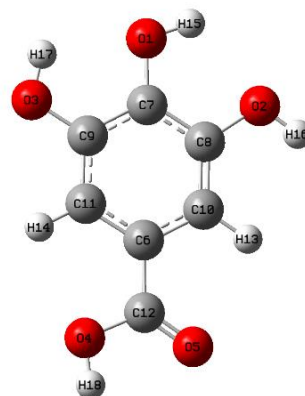
Hình 6. Đồ thị biểu diễn mối quan hệ giữa nồng độ Trolox và độ hấp thụ của nó

#### 4.4 Tính toán hóa lượng tử cho gallic acid

Phương pháp  $\omega$ -B97XD/6-311++G(d,p) [4] được sử dụng để tối ưu hóa cấu trúc của gallic acid (Hình 7) và tính toán hằng số tốc độ phản ứng giữa gallic acid với gốc tự do  $HOO^{\bullet}$  [16]. Hai cơ chế được lựa chọn để đánh giá khả năng phản ứng của chúng là cơ chế phản ứng là phản ứng chuyển nguyên tử hydro và phản ứng cộng.

#### Cơ chế phản ứng chuyển nguyên tử hydro

Khi xét theo cơ chế chuyển nguyên tử hydro, năng lượng phân ly liên kết (BDE) là một trong các đại lượng quan trọng cần khảo sát [17]. Gallic acid có bốn liên kết O-H dễ bị cắt đứt là O1-H15, O2-H16, O3-H17 và O4-H18. Các liên kết này lần lượt có giá trị BDE là 79,1, 80, 86,4 và 120,2 kcal·mol<sup>-1</sup> (Bảng 1). Như vậy, O1-H15 và O2-H16 là hai vị trí dễ cắt đứt liên kết nhất trong bốn vị trí khảo sát.



Hình 7. Cấu trúc tối ưu của gallic acid trong pha khí ở  $\omega$ -B97XD/6-311++G(d,p)

Bảng 1. Các giá trị tính toán được khi khảo sát phản ứng giữa gallic acid và  $HOO^{\bullet}$  theo cơ chế HAT

Liên kết	BDE(O-H) (kcal·mol <sup>-1</sup> )	$k_{HAT}$ (M <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )	$k_{HAT(total)}$ (M <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )
O1-H15	79,07	$4,52 \times 10^3$	$6,11 \times 10^4$
O2-H16	79,98	$5,66 \times 10^4$	
O3-H17	86,42	$2,23 \times 10^1$	
O4-H18	120,19	$2,05 \times 10^{-12}$	

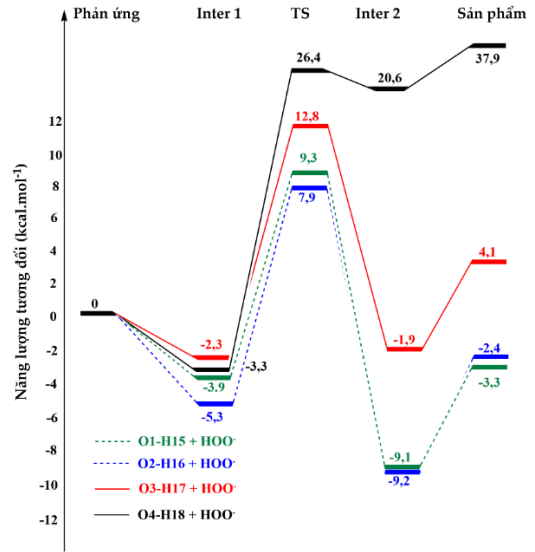
Bề mặt thế năng của phản ứng giữa gallic acid và HOO• theo cơ chế HAT được biểu diễn ở Hình 8. Các phản ứng bắt đầu với sự hình thành của trạng thái trung gian 1 (Inter 1), qua trạng thái chuyển tiếp (TS), hình thành trạng thái trung gian 2 (Inter 2) và tạo ra sản phẩm. Nhìn chung, vị trí O1-H15 và O2-H16 có các giá trị năng lượng Inter 1, TS và Inter 2 thấp nhất trong bốn liên kết O–H khảo sát. Đây cũng là các vị trí có hiệu ứng nhiệt tạo thành sau các phản ứng có các giá trị âm, chứng tỏ các phản ứng này là tỏa nhiệt.

Hằng số tốc độ phản ứng của gallic acid ở các vị trí O1-H15, O2-H16, O3-H17 và O4-H18 có giá trị lần lượt là  $4,52 \times 10^3$ ,  $5,66 \times 10^4$ ,  $2,23 \times 10^1$  và  $2,05 \times 10^{-12} \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  (Bảng 1). Như vậy, O1-H15, O2-H16 là hai vị trí có khả năng phản ứng nhanh nhất trong phân tử gallic acid. Dựa vào phương trình (7), chúng tôi tính được  $k_{\text{HAT}}(\text{total})$  với giá trị là  $6,11 \times 10^4 \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ .

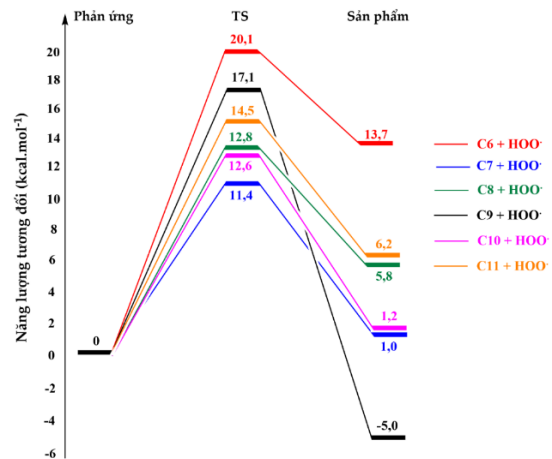
**Cơ chế phản ứng cộng**

Phân tử gallic acid có các liên kết đôi ở nhân thơm; vì vậy, nó có thể phản ứng với HOO• theo cơ chế phản ứng cộng ở các vị trí C6, C7, C8, C9, C10 và C11. Hình 9 trình bày bề mặt thế năng theo cơ chế phản ứng cộng khi gallic acid phản ứng với gốc tự do HOO•.

Quan sát Hình 9, có thể thấy năng lượng tương đối của trạng thái chuyển tiếp ở các vị trí C6, C7, C8, C9, C10 và C11 có giá trị lần lượt là 20,1, 11,4, 12,8, 17,1, 12,6 và 14,5 kcal·mol<sup>-1</sup>. Như vậy, phản ứng ở vị trí C7 có giá trị TS thấp nhất. Dựa vào phần mềm Eyringpy [18], chúng tôi tính hằng số tốc độ phản ứng theo cơ chế RAF ( $k_{\text{RAF}}$ ) (Bảng 2). Các phản ứng ở C6, C7, C8, C9, C10 và C11 lần lượt có giá trị  $k_{\text{RAF}}$  là  $6,62 \times 10^{-10}$ ,  $9,03 \times 10^{-4}$ ,  $4,82 \times 10^{-5}$ ,  $2,35 \times 10^{-7}$ ,  $1,14 \times 10^{-4}$  và  $1,51 \times 10^{-5} \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ . Như vậy, gallic acid phản ứng với HOO• chủ yếu ở vị trí C7.



**Hình 8.** Bề mặt thế năng của phản ứng giữa gallic acid và gốc HOO• theo cơ chế HAT



**Hình 9.** Bề mặt thế năng của phản ứng giữa gallic acid và HOO• theo cơ chế RAF

**Bảng 2.** Các kết quả tính toán được khi khảo sát phản ứng giữa gallic acid và HOO• theo cơ chế RAF

Vị trí	$\Delta G^\ddagger$ (kcal·mol <sup>-1</sup> )	$k_{\text{RAF}}$ (M <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )	$k_{\text{RAF}}(\text{total})$ (M <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )
C6	30,2	$6,62 \times 10^{-10}$	1,08 × 10 <sup>-3</sup>
C7	21,9	$9,03 \times 10^{-4}$	
C8	23,5	$4,82 \times 10^{-5}$	
C9	26,8	$2,35 \times 10^{-7}$	
C10	23	$1,14 \times 10^{-4}$	
C11	24,3	$1,51 \times 10^{-5}$	

Dựa vào công thức (8), hằng số tốc độ tổng cộng theo cơ chế phản ứng cộng ( $k_{RAF(total)}$ ) giữa gallic acid và  $HOO\cdot$  là  $1,08 \times 10^{-3} M^{-1}\cdot s^{-1}$ . So với hằng số tốc độ phản ứng tổng cộng theo cơ chế HAT, giá trị này nhỏ hơn rất nhiều. Như vậy, phản ứng giữa gallic acid và  $HOO\cdot$  chủ yếu xảy ra theo cơ chế chuyển nguyên tử hydro.

## 5 Kết luận

Các phương pháp đo quang phổ và tính toán hóa lượng tử đã được sử dụng để đánh giá khả năng chống oxy hóa của gallic acid. Trong phương pháp DPPH $\cdot$ , gallic acid có khả năng bắt gốc tự do DPPH $\cdot$  với giá trị  $IC_{50DPPH}$  là  $2,23 \pm 0,02 \mu M$ . Trong phương pháp ABTS $^{+}$ , hợp chất này trung hòa các cation gốc tự do ABTS $^{+}$  với giá trị  $IC_{50ABTS}$  là  $12,20 \pm 0,03 \mu M$ . Các giá trị  $IC_{50}$  của gallic acid đều nhỏ hơn khi so sánh với Trolox. Bên cạnh đó, phương pháp phosphomolybdenum cho thấy khả năng khử Mo(VI) về Mo(V) của gallic acid và Trolox là tương đương nhau. Các tính toán hóa lý thuyết ở  $\omega$ -B97XD/6-311++G(d,p) ở pha khí đều chỉ ra rằng gallic acid phản ứng với gốc tự do  $HOO\cdot$  chủ yếu theo cơ chế HAT.

### Thông tin tài trợ

Nghiên cứu này được Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế, tài trợ trong đề tài mã số T.22-TN-01.

### Mâu thuẫn lợi ích

Không có lợi ích tài chính cạnh tranh hay mối quan hệ cá nhân nào có thể ảnh hưởng đến công trình nghiên cứu của bài báo.

### Tài liệu tham khảo

1. Badhani B, Sharma N, Kakkar R. Gallic acid: a versatile antioxidant with promising therapeutic and industrial applications. *RSC Advances*. 2015; 5(35):27540-57.

2. Kim DO, Lee KW, Lee HJ, Lee CY. Vitamin C equivalent antioxidant capacity (VCEAC) of phenolic phytochemicals. *Journal of agricultural and food chemistry*. 2002;50(13):3713-7.
3. Schlesier K, Harwat M, Bohm V, Bitsch R. (2002) Assessment of antioxidant activity by using different in vitro methods. *Free radical research*. 2002;36(2):177-87.
4. Chai JD, Head-Gordon M. Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections. *Physical chemistry chemical physics: PCCP*. 2008;10(44):6615-20.
5. Masek A, Chrzescijanska E, Latos M, Zaborski M, Podsedek A. Antioxidant and Antiradical Properties of Green Tea Extract Compounds. *International Journal of Electrochemical Science*. 2017;12:6600-10.
6. Prieto P, Pineda M, Aguilar M. Spectrophotometric quantitation of antioxidant capacity through the formation of a phosphomolybdenum complex: specific application to the determination of vitamin E. *Analytical biochemistry*. 1999;269(2):337-41.
7. Capaldo L, Ravelli D. Hydrogen Atom Transfer (HAT): A Versatile Strategy for Substrate Activation in Photocatalyzed Organic Synthesis. *European journal of organic chemistry*. 2017;(15):2056-71.
8. Mayer JM. Understanding hydrogen atom transfer: from bond strengths to Marcus theory. *Accounts of chemical research*. 2011;44(1):36-46.
9. Milenković DA, Dimić DS, Avdović EH, Amić AD, Dimitrić Marković JM, Marković ZS. Advanced oxidation process of coumarins by hydroxyl radical: Towards the new mechanism leading to less toxic products. *Chemical Engineering Journal*. 2020; 395:124971.
10. Ahmadi S, Marino T, Prejano M, Russo N, Toscano M. Antioxidant Properties of the Vam3 Derivative of Resveratrol. *Molecules*. 2018;23(10).
11. Nithya P, Madhavi C. Antioxidant activity of 3-arylidene-4-piperidones in the 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl scavenging assay. *J Taibah Univ Sci*. 2018;11(1):40-5.
12. Martinez-Morales F, Alonso-Castro AJ, Zapata-Morales JR, Carranza-Álvarez C, Aragon-Martinez OH. Use of standardized units for a correct interpretation of  $IC_{50}$  values obtained from the inhibition of the DPPH radical by natural antioxidants. *Chemical Papers*. 2020;74(10):3325-34.
13. Echegaray N, Pateiro M, Munekata PES, Lorenzo JM, Chabani Z, Farag MA, et al. Measurement of

- Antioxidant Capacity of Meat and Meat Products: Methods and Applications. *Molecules*. 2020;26(13).
14. Uddin MN, Mitra K, Haque MZ. Comparative Bio-Active Compounds Determination and In Vitro Antioxidant Properties of Newly Developed Soy Mixed Wheat Flour and Traditional Wheat Flour. *Int J Food Prop*. 2016;19(9):2113-26.
  15. Bibi Sadeer N, Montesano D, Albrizio S, Zengin G, Mahomoodally MF. The Versatility of Antioxidant Assays in Food Science and Safety-Chemistry, Applications, Strengths, and Limitations. *Antioxidants*. 2020;9(8).
  16. Galano A, Alvarez-Idaboy JR. A computational methodology for accurate predictions of rate constants in solution: application to the assessment of primary antioxidant activity. *J Comput Chem*. 2013;34(28):2430-45.
  17. Wright JS, Johnson ER, DiLabio GA. Predicting the Activity of Phenolic Antioxidants: Theoretical Method, Analysis of Substituent Effects, and Application to Major Families of Antioxidants. *Journal of the American Chemical Society*. 2001;123(6):1173-83.
  18. Galano A, Alvarez-Idaboy JR. A computational methodology for accurate predictions of rate constants in solution: application to the assessment of primary antioxidant activity. *Journal of computational chemistry*. 2013;34(28):2430-45.