

А.Г. Ревенко, Е.В. Худоногова

**РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЙ НЕОСНОВНЫХ И СЛЕДОВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В РАЗЛИЧНЫХ ТИПАХ ГОРНЫХ ПОРОД, ПОЧВ И ОТЛОЖЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СПЕКТРОМЕТРА S4 PIONEER**

Представлены особенности разработанных методик определения содержаний 25 элементов в различных типах горных пород с использованием нового автоматического рентгеновского спектрометра S4 PIONEER фирмы Брюкер. Выбраны оптимальные условия измерения для исследуемых элементов. Рассмотрены различные варианты способов учета интенсивности рентгеновского фона: измерение интенсивности излучения для угловых позиций с коротко- и длинноволновой сторон от аналитической линии; использование интенсивности фона для удаленной угловой позиции, интенсивности характеристического излучения рентгеновской трубки. Приведены примеры и практические рекомендации для некоторых аналитических проблем. Представлены диапазоны определяемых содержаний отдельных элементов и результаты оценки метрологических характеристик разработанных методик.

Для решения задач в геологии одним из эффективных является рентгенофлуоресцентный метод анализа (РФА), который успешно применяется для количественного определения содержаний большого числа элементов в различных типах горных пород, почв, отложений и растительных материалов [1—3]. Успешному применению метода РФА в аналитике способствует хорошо разработанная теория, а также наличие автоматизированных аналитических систем на основе многоканальных и сканирующих спектрометров, оснащенных вычислительными комплексами. В течение последних 17-ти лет аналитическим центром Института земной коры СО РАН накоплен фактический материал по применению рентгенофлуоресцентного метода анализа (РФА) для количественного определения содержаний основных (Mg, Al, P, K, Ti, Mn, Fe; спектрометр СРМ-25) и следовых (S, Cl, V, Cr, Co, Ni, Zn, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Ba, La, Ce, Pb, Th, U; спектрометр ВРА-30) элементов [2, 4—8]. С появлением автоматизированных аналитических систем нового поколения с усовершенствованным программным обеспечением появилась потребность в доработке существующих ранее методик. В настоящем сообщении представлены результаты разработки аналитическим центром методик определения содержания 25 элементов в горных породах различного типа с использованием нового автоматического рентгеновского спектрометра S4 PIONEER фирмы Брюкер (Германия), укомплектованного персональным компьютером Intel Pentium.

Спектрометр S4 PIONEER фирмы Брюкер объединяет в себе аналитические возможности

волнодисперсионного рентгеновского спектрометра и сравнительно малые габариты. Определение содержаний элементов с малыми атомными номерами на этом спектрометре базируется на применении многослойных кристаллоанализаторов, отпаянного пропорционального счетчика Pro4 Super High Transmission и расположенной близко к пробе рентгеновской трубки со сверхтонким (75 мкм) окном. Спектрометр применим для анализа порошков, твердых тел, жидкостей, пленок. Однако при анализе порошков необходима продувка гелием и из-за этого возможности такого варианта на нашем спектрометре пока не реализованы. Функции и протекание процессов внутри спектрометра контролируют несколько микропроцессоров. Главный процессор координирует внутренние информационные потоки и осуществляет связь с внешним компьютером, обрабатывающим данные.

Программное обеспечение SPECTRA<sup>plus</sup> рентгеновского спектрометра S4 PIONEER поставляется вместе с библиотекой рентгеновских линий. С помощью этой программы возможна разработка методик для решения конкретных задач, то есть, выбор условий и параметров измерения, измерение калибровочного массива, выбор оптимальных калибровочных уравнений и осуществление математической обработки калибровочного массива стандартных образцов (СО) [10]. Эта возможность использована авторами для разработки методики количественного определения содержаний большого числа элементов в горных породах различного типа.

Анализируемый материал прессовали в таблетки одинаковой плотности с помощью полуавтоматического прессы. Минимальная масса ис-

следуемого образца, необходимого для анализа, составляет 1—1.5 г. Образец должен быть гомогенным по гранулометрическому и химическому составу (диаметр частиц менее 0.074 мм). В качестве подложки использовали борную кислоту.

При разработке методик определения для отдельных исследуемых элементов в горных породах были выбраны оптимальные условия измерения: угловые позиции для измерения интенсивностей аналитических линий и фона, условия возбуждения (потенциал и сила тока для рентгеновской трубки), толщина и материал фильтра на пути первичного излучения, время измерения интенсивностей. Измерение интенсивностей аналитических линий и фона для набора градуировочных стандартных образцов (СО) обеспечивается программой Loader. Программное обеспечение рентгеновского спектрометра позволяет выбирать оптимальные калибровочные уравнения для учета взаимных влияний элементов и коэффициенты для учета наложения соседних линий с помощью программы Fquant. На рис. 1 в качестве примера представлены варианты градуировочных графиков для Ni. График на рис. 1, а построен по интенсивностям линий за вычетом фона, а на рис. 1, б показан вид графика после введения поправок на взаимные влияния элементов способом стандарта фона.

В табл. 1 в качестве примера приведены величины интенсивностей для некоторых аналитических линий и фона. Измерения выполнены для следующих условий: напряжение на рентгеновской трубке 40 или 50 кВ, сила тока 60 или 50 мА, время измерения 50 с. В таблице пред-

Т а б л и ц а 1

Интенсивности аналитических линий и фона (Rh-анод,  $t=50$  с, образец — ДВТ)

Линия	$C_A$ , ppm	$I_L$	$I_\Phi$	$D$ , ppm
PbL $\beta_1$	40	383	5362	3.6
ZnK $\alpha$	60	2320	2905	0.3
NiK $\alpha$	4	212	1552	0.3
MnK $\alpha$	140	731	654	1.0
BaL $\alpha$	50	24.2	117.3	5.1
SK $\alpha$	60	116	141	1.5

ставлено число импульсов в секунду. Отметим, что значения пределов обнаружения  $D$  оценивались программой Fquant ориентировочно. В зависимости от типа горной породы интенсивность фона изменялась примерно в 2 раза. Нами детально исследованы различные варианты учета рентгеновского фона для некоторых типичных ситуаций. Показано, что в ряде случаев вариант измерения фона с коротковолновой и длинноволновой стороны от угловой позиции аналитической линии не является оптимальным. Рис. 2 иллюстрирует это положение. Рассмотрены случаи регистрации излучения Ва с использованием его BaL $\alpha$ -линии для образцов с различным содержанием TiO $_2$  и Ва. Содержания отдельных элементов взяты из работ [11, 12]. На рис. 2, а показан скан в случае малого содержания как TiO $_2$ , так и Ва (соответственно 0.012 и 0.007 %). В данном случае содержание Ва существенно выше его предела обнаружения для

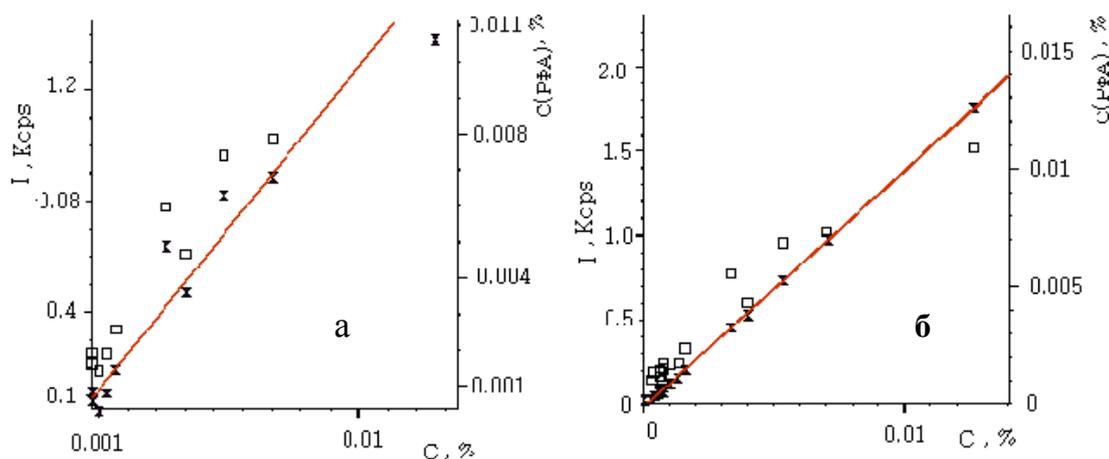


Рис. 1. Градуировочный график для Ni: а — без учета взаимных влияний элементов; б — после введения поправок на взаимные влияния элементов.

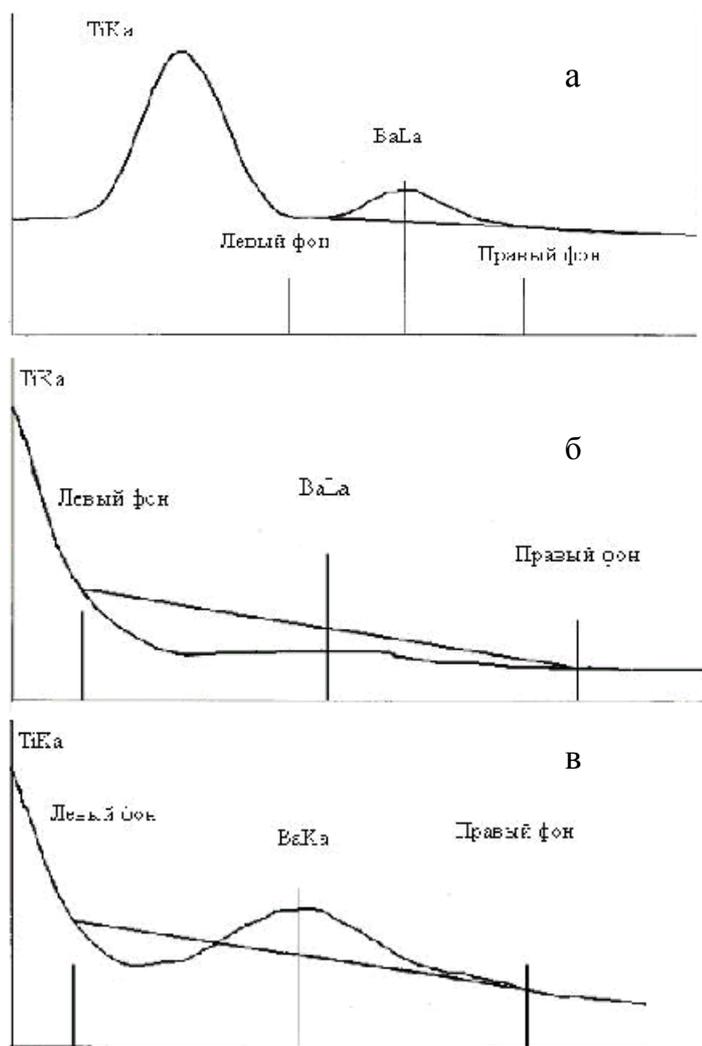


Рис. 2. Скан спектра в районе  $BaL_{\alpha}$ -линии. *а* — Образец СО ДВГ:  $TiO_2$  — 0.012, Ва — 0.007 %; *б* — образец СО DNC:  $TiO_2$  — 0.48, Ва — 0.0114 %; *в* — образец СО GM:  $TiO_2$  — 0.212, Ва — 0.034 %.

выбранных условий эксперимента.

С использованием этого образца были выбраны угловые позиции для измерения фона с коротковолновой (левый фон) и длинноволновой (правый фон) сторон от аналитической линии. Рис. 2, *б* показывает, что при увеличении содержания  $TiO_2$  длинноволновый хвост линии  $TiK_{\alpha}$  будет существенно увеличивать интенсивность левостороннего фона для  $BaL_{\alpha}$ -линии. В этом случае зарегистрированная интенсивность  $BaL_{\alpha}$ -линии после вычета среднего фона будет отрицательной величиной. Из рис. 2, *в* очевидно, что будет иметь место существенное занижение интенсивности  $BaL_{\alpha}$ -линии и соответственно определяемой концентрации Ва.

Рис. 3 и 4 характеризуют проблемы выбора фоновых позиций в области длин волн  $CrK_{\alpha}$ — $CeL_{\alpha}$ -линий и  $NiK_{\alpha}$ — $RbK_{\alpha}$ -линий. В первом диапазоне длин волн расположены аналитические линии Cr, V, Ce и Nd, а во втором — Ni, Cu, Zn, Ga, As, Rb, Th и U. Отметим, что близкие по величине интенсивности, зарегистрированные для  $ZnK_{\alpha}$ - и  $CuK_{\alpha}$ -линий, объясняются вкладом излучения меди от деталей спектрометра. Для последнего набора элементов проверено и рекомендовано использование одной угловой позиции для определения фона всех перечисленных элементов [2]. Применение этого варианта учета фона позволяет избежать ошибок в случае близкого расположения линий в спектре. Такой подход позволяет также снизить затраты на проведение анализа. Выбранная угловая позиция на рис. 4 условно обозначена как  $HgL_{\alpha}$ . Эта же интенсивность фона применялась для введения поправок на взаимные влияния элементов в способе стандарта фона. Фоновые коэффициенты  $K$ , устанавливающие отношение интенсивностей  $I_{\phi}$  и  $I_{\phi 1}$ , в соотношении:

$$I_{\phi} = K \cdot I_{\phi 1} \quad (1)$$

для каждой аналитической линии определяются экспериментально. Отметим, что такой вариант возможен только при стабильно работающей рентгеноспектральной аппаратуре. В любом случае для этого варианта необходимо постоянно оценивать величину коэффициента  $K$  в соотношении (1) для каждой из аналитических линий. Кроме этого, при наличии вклада в регистрируемую интенсивность аналитической линии излучения исследуемого элемента от деталей спектрометра (рентгеновской трубки, коллиматора и др., в нашем случае это верно для  $CuK_{\alpha}$ -линии) определение уровня фона вблизи от аналитической линии может оказаться недостаточным для оценки его величины на месте линии.

Диапазоны определяемых элементов (в %) составили: 0.003–1.7 для Cl, 0.0012–0.44 для S, 0.01–2.15 для  $P_2O_5$ , 0.01–5.69 для  $K_2O$ , 0.09–10.0 для CaO, 0.005–2.7 для  $TiO_2$ , 0.0003–0.04 для V, 0.0006–0.32 для Cr, 0.014–1.04 для MnO, 0.47–10 для  $Fe_2O_3$ , 0.0002–0.0159 для Co, 0.0003–0.22 для Ni, 0.0004–0.074 для Cu, 0.0015–0.2

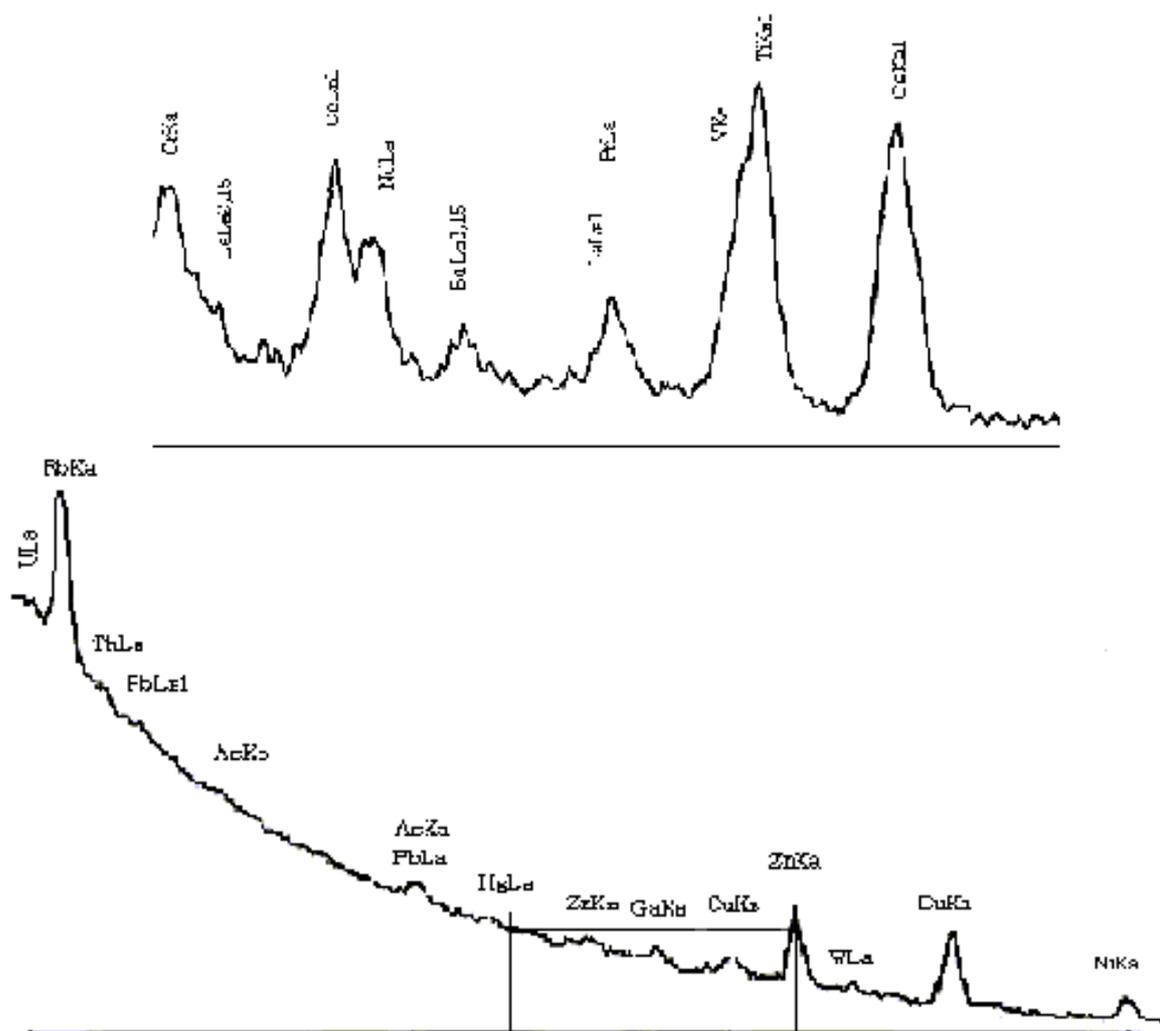


Рис. 3. Скан спектра в районе  $\text{CrK}_\alpha$ — $\text{CeL}_\alpha$ -линий. Образец СО СГХМ-3:  $\text{TiO}_2$  — 0.212, V — 0.0075, Cr — 0.0029, Ba — 0.034, La — 0.022, Ce — 0.05, Nd — 0.03 %.

Рис. 4. Скан спектра в районе  $\text{NiK}_\alpha$ — $\text{RbK}_\alpha$ -линий. Образец СО СИ-2: Ni — 0.0005, Cu — 0.0004, Zn — 0.003, Ga — 0.0002, As — 0.0002, Rb — 0.0015, Pb — 0.0013, Th — 0.00018, U — 0.0001 %.

для Zn, 0.0004–0.2 для Rb, 0.0002–0.04 для Sn, 0.0019–0.32 для Ba, 0.0007–0.022 для La, 0.001–0.05 для Ce, 0.001–0.01 для Nd, 0.0004–230 для Pb, 0.0002–0.013 для Th и 0.0001–0.0063 для U. Практика показала, что для обеспечения приемлемой правильности целесообразно калибровать варианты методик для определенных типов горных пород. Например, мы выделяем обычно изверженные горные породы, карбонатные породы и отдельно почвы и отложения. Вследствие недостаточного количества СО отдельных типов горных пород с аттестованными содержаниями конкретных элементов возможно применение отдельных СО в разных вариантах методик.

Программное обеспечение рентгеновского спектрометра S4 EXPLORER позволяет выбирать оптимальные калибровочные уравнения с помощью программы Fquant и выполнять математическую обработку результатов измерения интенсивностей набора СО, используемого для калибровки методики. С помощью этой же программы вычисляли коэффициенты для учета вклада наложения линий, длины волн которых близки к длинам волн определяемых элементов. В программном обеспечении предлагается следующий вариант калибровочного уравнения:

$$C_i = m_i \cdot I_i \cdot (1 + \sum \alpha_{ij} \cdot I_j), \quad (2)$$

где  $C_i$  и  $I_i$  — концентрация и интенсивность

аналитической линии калибруемого элемента, исправленная в соответствии с фоном;  $m_i$  — наклон калибровочного графика;  $I_j$  — интенсивности матричных элементов, с поправкой на фон.

При калибровке уравнений с помощью метода наименьших квадратов в качестве параметра минимизации использованы относительные квадратичные отклонения концентраций:

$$\sum_n \left( \frac{C_n^{chem} - C_n^{XRF}}{C_n^{chem}} \right)^2, \quad (3)$$

где  $C_n^{chem}$  — аттестованные,  $C_n^{XRF}$  — вычисленные значения концентрации  $n$ -го СО.

Стандартные образцы, используемые для калибровки отдельных определяемых элементов, выбирались из коллекции СО кислого, основного, ультраосновного, карбонатно-силикатного и карбонатного составов, имеющихся в наличии в нашей лаборатории (более 100 отечественных и зарубежных СО). При расчете градуировочных характеристик для каждого определяемого элемента некоторые СО были исключены из калибровочного массива по следующим причинам: 1) значение концентрации определяемого элемента для данного СО не аттестовано или определено ориентировочно, то есть число результатов измерений для этого образца было недостаточным на стадии аттестации; 2) аттестованное значение концентрации определяемого элемента ниже предела обнаружения; 3) матрица СО резко отличается от матриц основного калибровочного массива.

Оценка метрологических характеристик методик определения содержаний элементов в соответствии с новым ГОСТом (Р ИСО 5725-2000) является довольно трудоемкой задачей. Поэтому в настоящее время их оценка выполнена только для некоторых из разработанных нами методик. По результатам метрологических исследований сделан вывод о том, что метрологические характеристики для большинства элементов в пределах исследованных диапазонов соответствуют методикам I—III категории точности. Предел обнаружения для разработанной методики рассчитывался по формуле:

$$C_{\min} = \frac{\sqrt[3]{I_{\Phi}}}{\bar{I}} \cdot C, \quad (4)$$

где  $\bar{I}$  — разность между средним значением интенсивности, измеренной на месте аналитической

линии, и интенсивностью фона  $I_{\Phi}$ ;  $C$  — концентрация определяемого элемента в данном образце. Для выбранных условий количественного определения предел обнаружения составил (в ppm): 1 для V и Co, 1.5 для Ni, Zn,  $S_{\text{общ}}$  и Ga, 2 для Cr и Cu, 2.5 для MnO и  $Fe_2O_3_{\text{общ}}$ , 3 для Cl, Sn и Pb, 5 для La и  $K_2O$ , 6 для  $P_2O_5$  и  $TiO_2$ , 7 для Ce, 9 для Nd, 12 для Ba.

Для образцов с большими концентрациями углерода (получены химическим обогащением углистых сланцев) разработана методика, в которой для поправок на взаимные влияния элементов дополнительно использована интенсивность аналитической линии  $SK_{\alpha}$ . Введение этой поправки позволило снизить ошибки определения концентраций исследуемых элементов до приемлемого уровня. Определение содержания углерода выполнено нами в диапазоне от 1 до 100 %.

В рамках программы GEOPT (An International Proficiency Test for Analytical Geochemistry Laboratories — Международное профессиональное тестирование аналитических геохимических лабораторий) [12] выполнено определение содержаний ряда элементов в образце отложений (15 раундов, апрель 2004 г.). Тестирование организовано Международной ассоциацией геоаналитиков. В 15-м раунде принимали участие 79 лабораторий, в том числе 3 из России. Условия тестирования предполагают, что лаборатории-участники выдают после проведения анализа по одному результату определения концентрации для каждого элемента. По определявшимся на используемом в нашей работе рентгеновском спектрометре PIONEER элементам в аналитическом центре ИЗК СО РАН другими методами были получены следующие данные (табл. 2).

Здесь использованы следующие обозначения: VRA — РФА на спектрометре VRA-30 (аналитики Худоногова Е.В. и Штельмах С.И.); ЭД — энергодисперсионный РФА на спектрометре с поляризатором (аналитик Ревенко В.А.); ICP MS — масс-спектральный анализ с индуктивно-связанной плазмой (аналитики Пантеева С.В. и Маркова В.В.) и АЭА — атомно-эмиссионный спектральный анализ, спектрограф ДФС-13 (аналитики Щербань В.В. и Володина Н.Н.). Качество представленных результатов оценивается в программе GeoPT по критерию  $Z = (X - X_a) / H(a)$ ,  $X$  — результат анализа;  $X_a$  — принятое содержание элемента в исследуемом образце;  $H(a)$  — допустимая погрешность результата анализа.

Т а б л и ц а 2

Сопоставление результатов РФА и данных, полученных другими методами анализа (в ppm)

Элемент	ГЕОРТ	Ац, PIONEER	Z	АЭА	ICP MS	РФА
Ba	272.6	293	1.1	280	241.2	ЭД 292
La	16.3	16.6	0.2		15.5	
V	197.9	212	1.0	190		
Ce	34.4	29.6	-1.5		33.9	
Nd	20.2	18.2	-1.0		17.5	
Cr	77.4	72.6	-0.7	65		
Co	23.7	25.7	0.8	23		
Ni	29.0	<b>36.6</b>	<b>2.7</b>	<b>36</b>		<b>VRA 50</b>
Zn	92.6	98.7	0.8			ЭД 86.7, VRA 89.5
Pb	17.4	18.2	0.5		<b>12.4</b>	ЭД <b>34.6</b> , VRA < <b>13</b>
Rb	32.9	37.2	1.4		32.3	ЭД <b>39.6</b> , VRA 33.4

Результаты международного тестирования получены в августе 2004 года (см. колонку "ГЕОРТ" в табл. 2). Жирным шрифтом выделены результаты, для которых величина  $Z > 2$ . Видно хорошее совпадение полученных нами результатов для большинства исследуемых элементов. Результаты определения содержания Ni в этом образце (PIONEER, АЭА и VRA) оказались завышенными (диапазон концентраций Ni по данным, полученным в 53 лабораториях, составил 12—44.7 ppm). Разработанные методики определения содержания исследуемых элементов внедрены в практику аналитического центра Института земной коры СО РАН.

Таким образом, разработаны методики рентгенофлуоресцентного определения содержания оксидов  $P_2O_5$ ,  $K_2O$ , CaO,  $TiO_2$ , MnO и  $Fe_2O_3$ , а также Cl, S, V, Cr, Co, Ni, Cu, Zn, Rb, Sn, Ba, La, Ce, Nd, Pb, Th и U в горных породах. Рассчитанные метрологические характеристики методик, реализованных с использованием рентгеновского спектрометра с дисперсией по длинам волн S4 PIONEER, показали, что методики соответствуют I—III категориям точности и их можно рекомендовать для анализа горных пород, почв и отложений.

РЕЗЮМЕ. Представлено особливості розроблених методик визначення вмісту 25 елементів у різних типах гірських порід з використанням нового автоматичного рентгеновського спектрометра S4 Pioneer фірми Брюкер. Обрано оптимальні умови вимірювання для дослід-

жуваних елементів. Розглянуто різні варіанти способів урахування інтенсивності рентгеновського фону: вимірювання інтенсивності випромінювання для кутових позицій з коротко- та довгохвильових боків від аналітичної лінії; використання інтенсивності фону для віддаленої кутової позиції, інтенсивності характеристичного випромінювання рентгеновської трубки. Наведено приклади та практичні рекомендації щодо деяких аналітичних проблем. Подано діапазони вмісту окремих елементів, що визначаються, і результати оцінки метрологічних характеристик розроблених методик.

SUMMARY. This paper presents the specific features of developed techniques for the determination of 25 element contents in different types of rocks using new Bruker S4 Pioneer automated spectrometer. The optimum measuring conditions of analyzed elements were selected. One studied in detail the different variants of procedures for accounting for a X-ray background intensity such as a measurement of a radiation intensity at angular positions on a short and long wavelength side of an analytical line, use of a background intensity at a distant angular position, use of an intensity of scattered characteristic radiation from an X-ray tube. The examples and practical recommendations for some analytical problems are presented. The analyzed material (about 1 g) is pressed into pellets of an equal density. The boric acid is used as a pellet substrate. The ranges of analyzed contents were presented. The metrological characteristics of the developed technique were calculated.

1. Афонин В.П., Гуничева Т.Н., Пискунова Л.Ф. Рентгенофлуоресцентный силикатный анализ. -Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1984.
2. Ревенко А.Г. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ природных материалов. -Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1994.
3. Ревенко А.Г. Proc. 1-st Intern. School on Contemporary Physics. Appl. Nuclear Physics (Ulaanbaatar, Mongolia, 2000). Ulaanbaatar: University Press, 2002. -P. 5—54.
4. Ревенко А.Г., Петрова Г.П., Ясныгина Т.А. // Тез. докл. Всерос. конф. по анализу объектов окружающей среды "Экоаналитика-96". -Краснодар: КубГУ, 1996. -С. 155—157.
5. Ревенко А.Г., Петрова Г.П., Тьков А.В., Ясныгина Т.А. Применение рентгеновских лучей в науке и технике. -Иркутск: ИГУ, 1995. -С. 58—68.
6. Китов Б.И., Ревенко А.Г., Ясныгина Т.А. и др. // Аналитика и контроль. -1999. -3, № 3. -С. 16—20.
7. Худогова Е.В., Черкашина Т.Ю., Ревенко А.Г. // Там же. -2001. -5, № 4. -С. 409—416.
8. Revenko A.G. X-Ray Spectrometry. -2002. -31, № 3. -P. 264—273.

9. Ревенко А.Г. // Аналитика и контроль. -2002. -6, № 3. -С. 231—246.
10. Сб. инструкций "Spectraplus" для пользователей спектрометра S4 Explorer.
11. Лончих С.В., Петров Л.Л. Стандартные образцы

состава природных сред. -Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1988.

12. Govindaraju K. Geostandards Newsletter: Special Issue. -1994. -Vol. 18.

Институт земной коры СО РАН, Иркутск

Поступила 08.06.2005

УДК 543.258:543.8

**Г.К. Зиятдинова, Г.К. Будников**

## **КУЛОНОМЕТРИЯ В АНАЛИЗЕ АНТИОКСИДАНТОВ**

Разработаны способы кулонометрического определения индивидуальных антиоксидантов в модельных растворах, лекарственных препаратах и биологических жидкостях человека с применением электрогенерированных титрантов — галогенов. Величины относительного стандартного отклонения составили 0.01—0.09. Найдены стехиометрические коэффициенты и предложены соответствующие схемы реакций.

Антиоксиданты (АО) — это важнейший объект исследования и анализа в науках о жизни. Причины такого внимания много. Одна из них состоит в профилактике старения организма и свободнорадикальных патологий, таких, как заболевания сердечно-сосудистой системы, неврологические, онкологические и другие заболевания [1—3].

Интерес к исследованию соединений, которые способны предотвращать процессы свободнорадикального окисления в клетках, впервые проявили биофизики и физиологи. Позже к решению таких задач пришли химики. В результате их плодотворного сотрудничества мы сейчас имеем огромный массив информации об АО, их функциях в живом организме, а благодаря химикам-синтетикам значительно расширен круг соединений этого типа.

АО — вещества различной химической природы, способные тормозить или устранять неферментативное свободнорадикальное окисление органических соединений различными формами кислорода. Биоантиоксиданты, подавляя свободнорадикальное окисление, регулируют степень влияния окисления на большинство метаболических процессов. Конечным итогом действия АО является создание оптимальных условий для метаболизма и обеспечение нормального роста клеток и тканей.

АО, функционирующие в живом организме (биоантиоксиданты), играют важную роль, защищая от неферментативного свободнорадика-

льного окисления биосубстраты, например легкоокисляющиеся липиды и, в частности, жиры и жирные кислоты мембранных образований клетки. Биоантиоксиданты являются необходимыми компонентами всех тканей и клеток живых организмов, где они в нормальных физиологических концентрациях поддерживают на низком стационарном уровне свободнорадикальные окислительные процессы. В норме расходование антиоксидантов и пополнение ими тканей живых организмов сбалансировано.

Биоантиоксиданты — это, как правило, полифункциональные соединения, антиокислительная функция которых выражена в разной степени. Различают АО, основная биологическая функция которых определяется или связана с антиоксидантной активностью, например токоферолы, и соединения, обладающие антиоксидантным действием, биологическая функция которых не связана с антиокислительными свойствами, например, антибиотики, обладающие в первую очередь бактерицидными свойствами, но оказывающие также антиоксидантное действие.

Биологическая активность АО обусловлена стереоэлектронными эффектами ароматического и хроманового колец, орто- и пара-положением гидроксильных групп, их трет-бутильным экранированием, образованием семихинонных форм, тиолсодержащими соединениями, хелатированием металлов переменной валентности, рецепторным взаимодействием с клеточной мембраной и т.д.

© Г.К. Зиятдинова, Г.К. Будников, 2005