

УДК 616.843.541.57.138

Кузнецова Т.Ю., Соловьева Н.В.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ МЕЛАТОНИНА И ГЛУТАТИОНА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ГИДРОКСИЛ-РАДИКАЛОМ

Полтавский национальный технический университет им. Ю. Кондратюка

Высшее государственное учебное заведение Украины «Украинская медицинская стоматологическая академия» г. Полтава

Проведен сравнительный анализ антиоксидантных свойств мелатонина и глутатиона по результатам неэмпирических квантово-химических расчетов взаимодействия с гидроксил-радикалом. Показано, что гидроксил-радикал стимулирует отрыв у молекул мелатонина и глутатиона «внешних» атомов водорода. Установлена инвариантность протекания таких реакций относительно концентрации гидроксил-радикала. Установлен приоритет антирадикальной активности глутатиона в сравнении с мелатонином.

Ключевые слова: антиоксиданты, мелатонин, гидроксил-радикал, глутатион

### Введение

Каталитическое окисление природных антиоксидантов, которое происходит под влиянием ферментов и ионов биометаллов переменной валентности, является предметом многочисленных исследований [1-3]. Это обусловлено возможностью использования результатов таких исследований для поддержки антиоксидантной системы организма, нормализации обмена веществ, оздоровления и торможения процессов старения [4-5].

Однако, исследование каталитического окисления *in vivo*, природных антиоксидантов, которое происходит под влиянием ферментов и ионов биометаллов переменной валентности, сопряжено с влиянием большого числа разнообразных взаимосвязанных процессов, стабилизация которых в условиях экспериментов на животных и даже на бактериях является весьма проблематичной. Очевидно, поэтому наблюдается непрерывное расширение круга исследований окислительных процессов *in vitro* с использованием различных физико-химических методов. Причем объектами таких исследований являются как экзогенные синтетические, так и природные эндогенные антиоксиданты, участвующие в системе защиты организма от «кислородного стресса» [6].

Особая роль в антиоксидантной системе защиты организма принадлежит трипептиду глутатиона (GSH). С ред-oxi реакциями, активностью и содержанием в тканях различных органов этого соединения связывают целый ряд патологий, таких как сахарный диабет, болезни Альцгеймера, Паркинсона и другие [7-8]. Причем, согласно многим предположениям, это обусловлено перекисной модификацией, поперечной сшивкой, а также деградацией белковых макромолекул, в состав которых входит глутатион [9]. Протекание таких преобразований белка происходит преимущественно, благодаря обратимому окислению - восстановлению сульфгидрильной группы глутатиона [10].

В литературе [11-13] также широко обсуждаются антиоксидантные свойства гормона шишковидной железы мелатонина (МЛТ), активность

которого сравнивают с активностью глутатиона, причем не в пользу последнего [14]. Такое заключение, с нашей точки зрения, является недостаточно корректным, поскольку в публикациях нет данных сравнительных исследований антиоксидантной активности этих соединений в одинаковых условиях и на молекулярном уровне.

С нашей точки зрения, достаточно корректно судить об антиоксидантной активности глутатиона и мелатонина можно на основании изучения реакций каталитического окисления этих соединений кислородом и его активными формами (АФК), при образовании последних *in vitro* в условиях, моделирующих «кислородный стресс» организма.

Возможность такого моделирования была установлена и успешно использована нами [15].

Анализ полученных нами результатов электрохимических исследований мелатонина и глутатиона позволил сделать следующие заключения.

Глутатион и мелатонин проявляют антирадикальную активность, где глутатион значительно более активный антиоксидант, чем мелатонин. А стимуляция мелатонином иммунной системы организма скорее всего связана с его способностью проникать сквозь биомембраны. [16].

В результате изучения влияния исследованных соединений на ионы двухвалентного железа, участвующие в образовании гидроксильных радикалов, показано, что глутатион, в отличие от мелатонина, действует как активный превентивный антиоксидант.

Полученные представления приближают к более глубокому пониманию механизмов процессов протекающих *in vivo* с участием глутатиона и мелатонина.

Все приведенное выше не дает прямого ответа об антиоксидантной активности глутатиона и мелатонина. Поэтому представляется целесообразным изучение механизма взаимодействия этих антиоксидантов (МЛТ и GSH) с гидроксил-радикалом методами квантовой химии, что на наш взгляд даст возможность на микроскопиче-