

сительно концентрации свободных радикалов.

5. Установлена перспективность квантово-химических расчетов для правильности передачи на наноуровне взаимодействий биологических молекул на макроуровне с целью научно-обоснованного объяснения воздействия антиоксидантов на различные свободные радикалы и активные формы кислорода.

Литература

1. Шаповал Г.С. Вольтамперометрическое исследование каталитических redox-процессов с участием аминокислот / Г.С. Шаповал, И.Е. Миронюк, В.Ф. Громова [и др.] // Катализ и нефтехимия. - 2006. - № 14 - С. 43-48.
2. Громова В.Ф. Электрохимическое моделирование элементарных стадий окислительно-восстановительных реакций в биосистемах / В.Ф. Громова, Г.С. Шаповал, В.П. Кухарь [и др.] // Доповіді НАН України. - 1995. - № 3 - С. 92-94.
3. Wetterberg L. Melatonin and clinical application / L. Wetterberg // Reprod. Nutr. Dev. - 1999. - V. 39, № 3. - P. 367-382.
4. Хавинсон В.Х. Влияние эпиталамина на свободнорадикальные процессы у человека и животных / В.Х. Хавинсон, В.Г. Морозов, В.Н. Анисимов // Успехи геронтологии. - 1999. - Вып. 3 - С. 259-265.
5. Boutin J. Molecular tools to study melatonin pathways and actions / J. Boutin, V. Audinot, G. Ferry // Trends Pharmacol. Sci. - 2005. - V. 26, № 8. - P. 409-412.
6. Беленичев И.Ф. Регуляция антиоксидантного гомеостаза и системы детоксикации организма гормоном мелатонином. Роль мелатонин-зависимых рецепторов в реализации этой функции / И.Ф. Беленичев, Ю.И. Губский, Е.Л. Левицкий [и др.] // Современ. проблемы токсикологии. - 2003. - № 2. - С. 2-16.
7. Арушанян Э.Б. Мелатонин и болезнь Альцгеймера / Э.Б. Арушанян // Неврология и психиатрия. - 2010. - № 1. - С. 100-106.
8. Бачурин С.О. Медико-химические подходы к направленному поиску препаратов для лечения и предупреждения болезни Альцгеймера / С.О. Бачурин // Вопросы медицинской химии. - 2001. - № 2. - С. 11-25.

9. Чеснокова Н.П. Молекулярно-клеточные механизмы инaktivации свободных радикалов в биологических системах / Н.П. Чеснокова, Е.В. Понукалина, М.Н. Бизенкова // Успехи современ. тестовознания - 2006. - № 7 - С. 29-41.
10. Hothorn M. Structural Basis for the Redox Control of Plasma Glutamate Cysteine Ligase Wächter / M. Hothorn // Journal Biological Chemistr - 2006. - V. 281. - P. 27557-27565.
11. Кветная Т.В. Мелатонин. Роль и значение в возрастной патологии / Т.В. Кветная, Под ред. В.Х. Хавинсона. - СПб. ВМЕД 2003. - 256 с.
12. Сорочан П.П. Рак молочной железы и мелатонин / П.П. Сорочан, И.А. Громакова // Онкология. - 2007. - Т.9. № 1. - С. 11-17.
13. Левин Я.И. Мелатонин и неврология / Я.И. Левин // Русск. медицинский журнал - 2007. - № 24. - С. 1851-1855.
14. Russel J. Melatonin: Lowering the High Price of Free Radicals / Russel // News Physiol. Sci. - 2000. - V. 15. - P. 246-250.
15. Шаповал Г.С. Электрохимическое исследование антиоксидантных свойств мелатонина / Г.С. Шаповал, Т.Ю. Кузнецова, В.В. Соловйов [и др.] // Доповіді НАН України. - 2009. - № 9. С. 159-164.
16. Delagrangre P. Melatonin, its receptors, and relationships with biological rhythm disorders / P. Delagrangre, B. Guardicla-Lemaître Clin. Neuropharmacol. - 1997. - V. 6. - P. 482-510.
17. Tsendra O. Interaction of some biomolecules with modified nanosilica surfaces studied by quantum chemistry / O. Tsendra, Datsyuk, V. Lobanov [et al.] // Surface Chemistry in Biomed. and Environmental Science - NATO Science Series - Series Mathematics, Physics and Chemistry / J.P. Blitz, V.M. Gunko 2006. - V. 228. - P. 315-324.
18. Tsendra O. Structure and properties of hydrated complexes methylphosphonic acids / O. Tsendra, A. Grebenyuk, V. Lobanov J. Mol. Struct.: THEOCHEM. - 2008. - V. 864 - P. 14-19.
19. Соловьев В.В. Квантово-химическое исследование влияния рмона мелатонина на активные формы кислорода / В.В. Соловьев, Т.Ю. Кузнецова // Актуальные вопросы теоретическо. прикладной биофизики, физики и химии. IV Всеукраин. на техн. конференция. - Севастополь, 2008. - С. 211-214.
20. Кузнецова Т.Ю. Перспективи в дослідженні антиоксидант. властивостей мелатоніну і глутатіону / Т.Ю. Кузнецова, В.В. Соловйов, Г.С. Шаповал [та ін.] // Проблеми й перспект. розвитку академічної та університетської науки. IV всеукраїн. науково-практична конференція. - Полтава, 2011. - С. 175.

Реферат

МОДЕЛЮВАННЯ АНТИОКСИДАНТНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕЛАТОНІНУ І ГЛУТАТІОНУ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ ІЗ ГІДРОКСИЛ-РАДИКАЛОМ

Кузнецова Т.Ю., Соловйова Н.В.

Ключові слова: антиоксиданти, мелатонін, гідроксил-радикал, глутатіон

Проведений порівняльний аналіз антиоксидантних властивостей мелатоніну і глутатіону за результатами неемпіричних квантово-хімічних розрахунків взаємодії із гідроксил-радикалом. Показано, що гідроксил-радикал стимулює відрив у молекул мелатоніну і глутатіону «зовнішніх» атомів водню. Встановлено інваріантність протікання таких реакцій щодо концентрації гідроксил-радикала. Встановлено пріоритет антирадикальної активності глутатіону у порівнянні з мелатоніном.

Summary

SIMULATION OF ANTIOXIDANT PROPERTIES OF MELATONIN AND GLUTATHIONE IN CONTACT WITH HYDROXYL RADICAL

Kuznetsova T.Y., Solovyova N.V.

Key words: antioxidants, melatonin, hydroxyl-radical, glutathione.

This paper highlights the comparative analysis of the antioxidant properties of melatonin and glutathione obtained by ab initio quantum and chemical calculations of the interaction with the hydroxyl-radical. It is shown that hydroxyl radical stimulates the separation of "external" hydrogen atoms in the molecules of melatonin and glutathione. We have established the invariance in the course of such reactions depending on the concentration of hydroxyl radical as well as the priority of the antiradical activity of glutathione compared to melatonin.