

Т.Ю.Кузнецова,  
В.В.Соловьев, д.х.н., проф.,  
\*Г.С.Шаповал, д.х.н., проф., \*О.С. Кругляк  
Полтавский национальный технический  
университет имени Юрия Кондратюка,  
\*Институт биоорганической химии и  
нефтехимии НАН Украины

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИОКСИДАНТНЫХ СВОЙСТВ МЕЛАТОНИНА

Для минимизации негативного воздействия активных форм кислорода, которые содержатся в ионизирующем излучении (солнечная и промышленная радиация, космические и рентгеновские лучи), в пище, воде и воздухе, на организм человека в последнее время в практической медицине широко применяются антиоксиданты (бета-каротин, витамины С и Е, селен и др.). Особое место в ряду антиоксидантов занимает гормон эпифиза - мелатонин (МЛТ) - N-ацетил-5-метокситриптамин, который является очень сильным антиоксидантом.

Поэтому, представляется целесообразным применение современных высокоточных неэмпирических квантово-химических расчетов для изучения электронного строения молекулы гормона и механизма взаимодействия мелатонина с активными формами кислорода, результаты которых дадут возможность на электронном уровне получить обоснование эффекта применения МЛТ.

Изучение механизма взаимодействия молекулы МЛТ и активных форм кислорода проводилось путем квантово-химических неэмпирических расчетов с применением пакета программ GAMESS (GAMESS версия от 5 июля 2005 года). В качестве активных форм кислорода (АФК) были взяты супероксид  $O_2^-$ , гидроксил радикал  $OH^\bullet$ , перекись водорода  $H_2O_2$ .

Проведенные квантовохимические расчеты позволили определить "направления атаки" отвечающие абсолютным минимумам потенциальной энергии взаимодействия активных форм кислорода с молекулой МЛТ. При проведении анализа взаимодействия были определены точки, которые отвечают, абсолютным минимумам потенциальной энергии взаимодействия активных форм кислорода с молекулой МЛТ, как наиболее вероятные "места атаки". Было выявлено, что три точки вероятного "места атаки" молекулы МЛТ супероксидом, гидроксил радикалом, перекисью водорода совпадают, определяя тем самым "активные центры" взаимодействия МЛТ с активными формами кислорода. Как показали расчеты, свободный радикал стимулирует отрыв атома водорода, который присоединяется к активным формам  $OH^\bullet$  кислорода с образованием молекулы воды в отличие от супероксида, который не отрывает атома водорода от молекулы МЛТ, указывая этим на различие механизма взаимодействия, объясняющего большую реактивность и токсичность  $OH^\bullet$  в сравнении с су пероксидом [1].

На рисунках 1 и 2 показан один из вариантов взаимодействия молекул МЛТ и  $OH^\bullet$ .

Для приближения результатов расчета к реальным процессам взаимодействия мелатонина с активными формами кислорода в организме человека и моделированию ситуации изменения концентрации МЛТ относительно АФК нами был предпринят расчет взаимодействия одновременно трех молекул гидроксил радикала ( $OH^\bullet$ ) с молекулой МЛТ (рис.3, рис.4).