

## **ГЕОМЕТРИЧНА Й ЕЛЕКТРОННА БУДОВА МЕЛАТОНІНУ ЗА ВІДСУТНОСТІ ТОКСИЧНИХ РЕЧОВИН**

Оточуюче середовище містить у собі велику кількість різних вільних радикалів (ВР), які, потрапляючи в організм людини, викликають пошкодження білків, нуклеїнових кислот та ліпідів біологічних мембран і володіють, в залежності від ситуації, мутагенною, канцерогеною або цитостатичною дією на організм людини, що призводить до розвитку різних патологічних станів (канцерогенез, атеросклероз, хронічні запалення, нервові дегенеративні захворювання та ін. Тому для зменшення негативного впливу вільних радикалів на біологічні об'єкти живого організму останнім часом у практичній медицині широко застосовуються ендogenous антиоксиданти у зв'язку з їх участю в системі захисту організму людини від агресивної дії вільних радикалів. Відсутність систематичних досліджень, особливо на молекулярному рівні, антирадикальної активності різних антиоксидантів при їх взаємодії з вільними радикалами в біологічних системах зумовлює не тільки наявність суперечливих оцінок в інтерпретації експериментально одержаних закономірностей, але й створює труднощі у розвитку загальних уявлень відносно механізму взаємодії антиоксидантів із вільними радикалами та цілеспрямованого підходу до керування цими процесами, які мають практичне застосування у медицині. Це актуалізує вивчення антирадикальної активності різних антиоксидантів.

Особливе місце в ряду антиоксидантів займає гормон епіфізу – мелатонін – N-ацетил-5-метокситриптамін ( $C_{13}H_{16}N_2O_2$ ), який, на думку авторів [1-3], є більш ефективним антиоксидантом на відміну від бета-каротину, вітамінів С і Е, селену та інших. Разом з тим позитивні результати застосування цього гормону при лікуванні онкологічних та інших захворювань, отримані на підставі лише аналізу медичних клінічних даних, не дозволяють пояснити і зрозуміти природу біохімічних процесів, що призводять до такого результату, і носять чисто феноменологічний характер.

Взаємодія антиоксидантів із вільними радикалами обумовлена впливом великої кількості різноманітних взаємопов'язаних процесів, стабілізація яких навіть в умовах експерименту є досить проблематичною. Разом з тим на сьогодні широко почало застосовуватися моделювання різних фізико-хімічних процесів на молекулярному рівні методами квантової хімії з подальшим аналізом результатів виконаних розрахунків.

Тому представляється актуальним вивчення ефективності дії ендогенних антиоксидантів шляхом моделювання механізму їх взаємодії із вільними радикалами методами квантової хімії в поєднанні з експериментальними методами, зокрема, електрохімічним, що, дає можливість не тільки отримати обґрунтування позитивного ефекту використання антиоксидантів, але й встановити потенційну значущість цих речовин як лікарських засобів.

Метою роботи було встановити рівноважну просторову будову та електронну структуру молекул мелатоніну.

Розрахунки виконувалися за допомогою різних варіантів програмного модуля GAMESS та програмного модуля Firefly 8 неемпіричним квантовохімічним методом у базисі 6-31G\*\*. У процесі обчислення використовували градієнтну техніку повної автоматичної оптимізації геометрії об'єктів з одночасною зміною довжин зв'язків і кутів до значення максимальної компоненти градієнта 0,001.

На підставі отриманих розрахунків геометричних параметрів молекули мелатоніну, зарядів на атомах по Льовдіну, міжатомних відстаней (R) і порядків зв'язків ( $B_{ij}$ ) між атомами в молекулі мелатоніну була побудована просторова модель молекули мелатоніну (рис. 1)

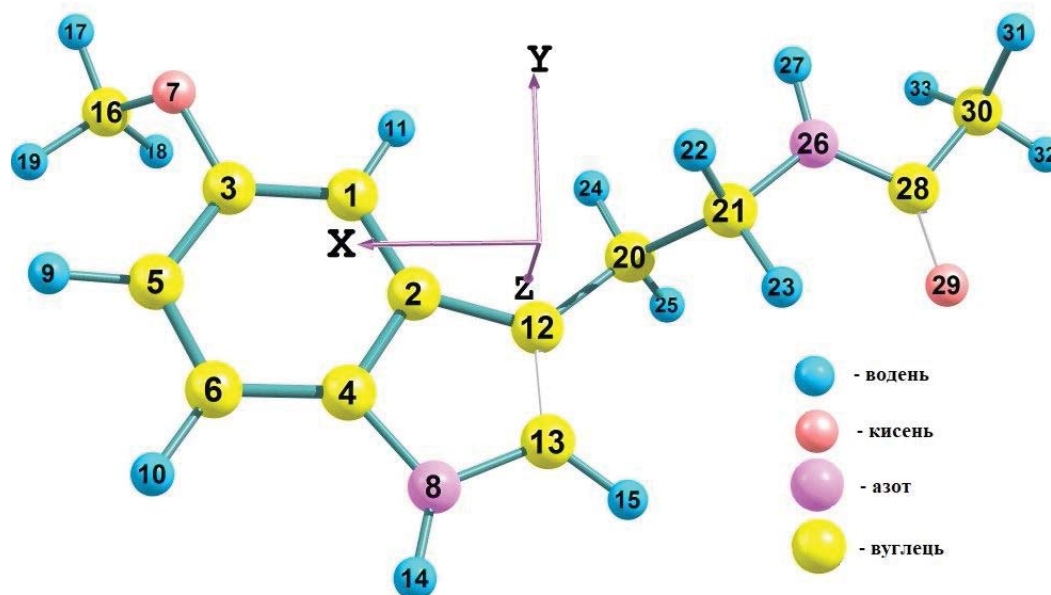


Рис.1. Рівноважна просторова будова молекули мелатоніну

#### Література

1. Анисимов В. Н. Мелатонин роль в организме, применение в клинике / В. Н. Анисимов –С-Пб.: Издат-во «Система», 2007. – 40 с.
2. Барабой В.А. Антиокислительная и биологическая активность мелатонина / В.А. Барабой. // Укр. біохім. журнал. 2000. Т 72, №3. – С. 5-11.
3. Беспятых А. Ю. Мелатонин как антиоксидант: основные функции и свойства / А. Ю. Беспятых, О. В. Бурлакова, В. А. Голиченков // Успехи современной биологии. – 2010. – Т. 130, № 5. – С. 487–496.