

3. Akkol E.K., Genç Y., Karpuz B. et al. (2020). Coumarins and Coumarin-Related Compounds in Pharmacotherapy of Cancer. *Cancers (Basel)*. 12(7): 1959.
4. Короткова І.В. Спектральні властивості та біологічна активність сполук ряду кумарину в об'єктах навколишнього середовища/Кол. монографія «Раціональне використання ресурсів в умовах екологічно стабільних територій»/ за ред. П.В. Писаренка, Т.О. Чайки, І.О. Яснолоб. П.: ТОВ НВП «Укрпромторгсервіс», 2018. С. 242-247.
5. David F.V. Lewis, Yuko Ito, Brian G. Lake. (2006). Metabolism of coumarin by human P450s: A molecular modelling study. *Toxicology in Vitro*. 20(2): 256-264
6. Korotkova I. (2020). Biological activity of coumarine and its derivatives. Scientific achievements of modern society. Abstracts of the 6th International scientific and practical conference. Cognum Publishing House. Liverpool, United Kingdom. P. 193-199.
7. Korotkova I. (2020). Carcinogenic properties of benz[a]pyrene and products of its metabolism. Innovative development of science and education. Abstracts of the 1st International scientific and practical conference. ISGT Publishing House. Athens, Greece. P. 133-138.
8. Короткова І.В. Теоретична оцінка канцерогенної природи бензпірену та його метаболітів/ Кол. монографія / за ред. П.В. Писаренка, Т.О. Чайки, О.О. Ласло. Полтава: Видавництво «Сімон», 2016. С. 111-125.

ЕЛЕКТРОХІМІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ АНТИРАДИКАЛЬНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЕНДОГЕННИХ АНТИОКСИДАНТІВ

Кузнецова Т.Ю., Шинкаренко В.І.

Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

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.

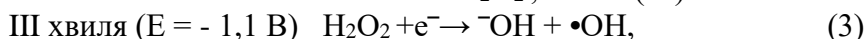
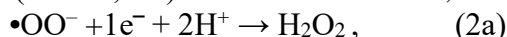
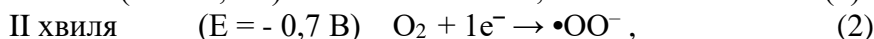
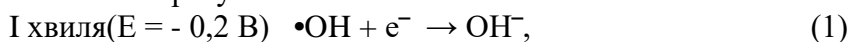
Взаємодія антиоксидантів із вільними радикалами обумовлена впливом великої кількості різноманітних взаємопов'язаних процесів, стабілізація яких навіть в умовах експерименту є досить проблематичною. Разом з тим на сьогодні широко почало застосовуватися моделювання різних фізико-хімічних процесів на молекулярному рівні методами квантової хімії з подальшим аналізом результатів виконаних розрахунків. Тому представляється актуальним вивчення ефективності дії ендogenous антиоксидантів мелатоніну і глутатіону шляхом моделювання механізму їх взаємодії із вільними радикалами (гідроксил-радикалом ($\bullet\text{OH}$) і супероксид-аніон-радикалом ($\bullet\text{OO}^-$)) електрохімічними методами, що, дає можливість не тільки отримати обґрунтування позитивного ефекту використання антиоксидантів, але й встановити потенційну значущість цих речовин як лікарських засобів.

Електрохімічні дослідження моделювання взаємодії антиоксидантів із вільними радикалами кисню проводили в Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України з використанням диференційної імпульсної вольтамперометрії за методикою запропонованою д.х.н., проф., Г.С. Шаповал; для дослідів використовували L-глутатіон фірми SERVA та мелатонін фірми Merck. Сполуки використовували без додаткового очищення. Розчини глутатіону та мелатоніну готували безпосередньо перед вимірами.

Раніше нами на основі моделювання взаємодії молекули мелатоніну (MLT) та глутатіону (GSH) з вільними радикалами $\bullet\text{OH}$ та $\bullet\text{OO}^-$ за результатами неемпіричних квантово-хімічних

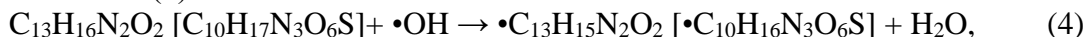
розрахунків була запропонована схема перерозподілу електронної густини в молекулах антиоксидантів під впливом вільних радикалів кисню, яка дозволила обґрунтувати мікроскопічний механізм антирадикальної активності молекули мелатоніну [1,2]. Для підтвердження отриманих на нанорівні квантовохімічних результатів були проведені електрохімічні дослідження взаємодії антиоксидантів з вільними радикалами кисню у водному фізіологічному розчині шляхом електрохімічного генерування вільних радикалів кисню в присутності антиоксиданту [3].

Диференціальні вольтамперні криві відновлення вільних радикалів кисню, які характеризують реакції (1-3), аналогічні тим, що протікають в біосистемах в процесі дихання, обміну речовин, кисневого стресу:



знімали на фоні 0,1М розчину NaCl у воді (фізіологічний розчин) з подальшим титруванням фонового електроліту добавками GSH та MLT різної концентрації (рис. 1).

При введенні у фоновий розчин добавок MLT і GSH різної концентрації спостерігали появу трьох хвиль. При цьому потенціал відновлення (φ) першої хвилі не змінювався, що вказує на відновлення однакових по типу та формі електрохімічно активних частинок (ЕАЧ). Збільшення концентрацій добавок MLT і GSH призводить до істотного зниження граничного струму перших хвиль на вольтамперних кривих за рахунок чисто хімічної реакції в об'ємній фазі розчину за схемою (4):



що вказує на зменшення кількості ЕАЧ типу $\bullet\text{OH}$.

Подальше відновленням $\bullet\text{OH}$, концентрація яких буде зменшуватися внаслідок реакції (4) при введенні добавок MLT[GSH] буде спостерігатися при незмінному потенціалі (0,2 В) на електроді за такою реакцією:

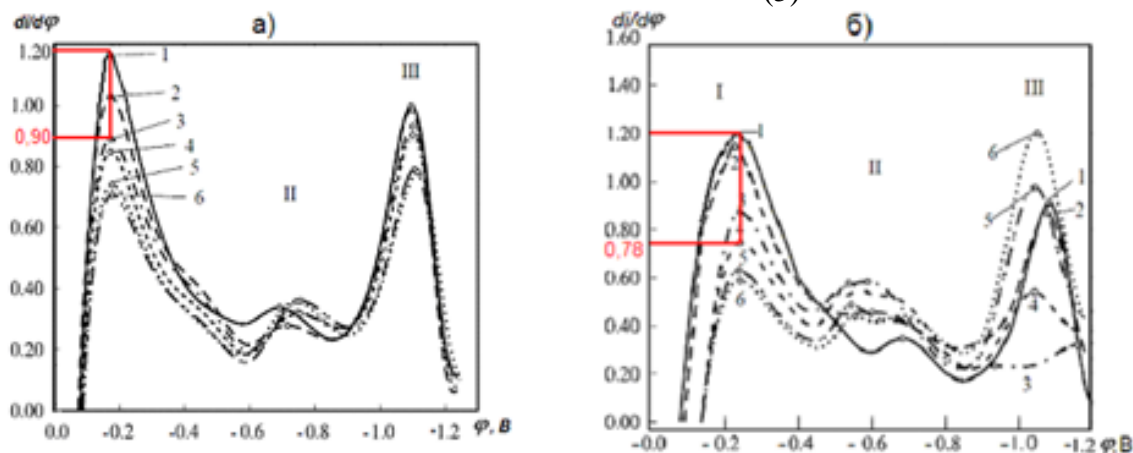


Рис. 1. Диференціальні вольтамперограми відновлення АФК на мідному катоді на фоні 0,1М NaCl у воді (1) в присутності різних концентрацій антиоксидантів: MLT(a): 2 – 0,39; 3 – **0,74**; 4 – 1,07; 5 – 1,67; 6 – $2,18 \cdot 10^{-3}$ М/дм³; GSH (б): 2 – 0,24; 3 – 0,47; 4 – **0,74**; 5 – 0,91; 6 – $1,1 \cdot 10^{-3}$ М/дм³.

На відміну від першої хвилі спостерігається катодний зсув другої хвилі потенціалу відновлення, встановлений як при введенні добавок MLT, так і GSH. Так як результати квантовохімічних досліджень взаємодії $\bullet\text{OO}^-$ з MLT та GSH не вказують на розрив водневих зв'язків в молекулах MLT і GSH, а вказують на вірогідність утворення комплексів, то

експериментально знайдений катодний зсув потенціалу 2 хвили відновлення для обох випадків, однозначно вказує на процес відновлення електроактивних комплексів, тип, форма і кількість яких визначається концентрацією MLT і GSH відносно $\bullet\text{OO}^-$. Зсув хвили відновлення $\bullet\text{OO}^-$ в присутності GSH відбувається в сторону зменшення значення потенціалу відновлення, а в присутності MLT – в бік збільшення, що підтверджує більш виражені антирадикальні властивості GSH у порівнянні з MLT. Таке обґрунтування зсуву другої хвили процесу одноелектронного відновлення ЕАЧ корелює із результатами квантовохімічної оцінки значень енергії активації при одноелектронному переносі заряду, які різняться для «ізольованої» молекули $\bullet\text{OO}^-$ та комплексів $\{\text{MLT}\bullet\text{OO}^-\}$ і $\{\text{GSH}\bullet\text{OO}^-\}$. Незмінність потенціалу відновлення та зменшення граничного струму (1 хвиля) та катодний зсув потенціалу (2 хвиля) зі збільшенням концентрації антиоксидантів при взаємодії із вільними радикалами для обох випадків є прямим підтвердженням на макрорівні результатів квантовохімічних розрахунків.

На макроскопічному рівні підтверджена принципова відмінність встановлена теоретично механізму інгібування молекулами антиоксидантів гідроксил- та супероксид-аніон-радикала на фоні превалюючої антирадикальної активності глутатіону в порівнянні з мелатоніном. Встановлена кореляція зміни макроскопічних параметрів процесу електровідновлення вільних радикалів кисню в присутності антиоксидантів з отриманими на нанорівні результатами квантовохімічних досліджень при взаємодії молекули мелатоніну та глутатіону із вільним радикалами кисню.

Список використаної літератури

1. Соловійов В.В. Моделювання антиоксидантних властивостей молекули мелатоніну при взаємодії з деякими вільними радикалами / В.В. Соловійов, Т.Ю. Кузнецова // Науковий вісник Чернівецького університету: Зб. наук. праць.: Хімія – 2012.– Вип. 606. – С.92–96;
2. Соловьев В.В. Сравнительное моделирование взаимодействия молекул глутатиона и мелатонина с гидроксил-радикалом по результатам неэмпирических квантово-химических расчетов / В.В. Соловьев, Т.Ю. Кузнецова // Укр. хим. журн. – 2012. – Т.78, № 8. – С.92–96;
3. Громова В.Ф. Электрохимическое моделирование элементарных стадий окислительно-восстановительных реакций в биосистемах /В.Ф. Громова, Г.С. Шаповал, В.П. Кухарь // Доповіді НАН України. – 1995. – № 3. – С. 92 – 94.

ОТРИМАННЯ РОСЛИННИХ ЕКСТРАКТІВ У КОСМЕТИЧНІЙ ПРОМИСЛОВОСТІ

Куленко О.А.

Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

На сьогоднішній день у косметичній промисловості все більше зростає попит на натуральні рослинні екстракти. Зараз відомо більше п'яти мільйонів органічних сполук, з яких більшість міститься в рослинах. Ці природні речовини відносяться до різних класів органічних сполук. У залежності від їх будови і властивостей екстрагувати їх можливо за допомогою різних екстрагентів. Найважливіша різниця між рослинними екстрактами та індивідуальною хімічною речовиною міститься в тому, що рослині екстракти містять в собі багато компонентів. Іноді один чи більше інгредієнтів відомі чи описані, але повний склад композиції ніколи невідомий.

Серед біологічно активних речовин, отриманих з рослин, в загальному виділяють жирні кислоти, тригліцериди жирних кислот (тобто жири та масла), фосфоліпіди, стерини, воски, алкалоїди, таніни, сапоніни, флаваноїди, глікозиди, дубильні речовини, білки, смоли, вітаміни. У залежності від поставлених цілей можливо як виділення з рослин індивідуальних, ретельно очищених речовин, так і отримання комплексів біологічно активних органічних речовин з повним збереженням їх природних властивостей [3].

Процес отримання рослинних екстрактів довготривалий та досить складний. Якість екстракту визначається декількома факторами [2]: