

*В.В.Соловійов, д.х.н, професор
Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»
Т.Ю.Кузнецова, к.х.н., доцент
Полтавський національний педагогічний університет імені В.Г. Короленка
О.Е. Ілляш, к.т.н., доцент
А.В.Іванченко, асистент
Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»*

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ МЕЛАТОНІНУ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ З O₂⁻ ПРИ ЛІКУВАННІ COVID-19

Найважливіша функція мелатоніну за результатами медичних клінічних досліджень – це антиоксидантна активність (поряд із геронтопротектною, антистресовою, імуномодельюючою, протизапальною та ін.), яка виявлена в організмі людини повсюди, так як мелатонін проникає в усі органи і тканини. 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.

Проведено моделювання антиоксидантної активності мелатоніну в аспекті його клінічного застосування при COVID-19, шляхом порівняння отриманих на нанорівні результатами квантово-хімічних досліджень (перерозподіл електронної густини, порядок зв'язків між атомами, енергетичні характеристики) зі змінами макроскопічних параметрів процесу електровідновлення активних форм кисню в присутності мелатоніну.

Проведені електрохімічні дослідження підтвердили антиоксидантні властивості мелатоніну, завдяки чому на макроскопічному рівні підтверджена принципова відмінність механізмів інгібування молекулами антиоксидантів гідроксил-радикалів та супероксид-аніон-радикалів на фоні превалюючої антиоксидантної активності з мелатоніном.

Доведена перспективність використання результатів квантово-хімічних розрахунків в поєднанні з електрохімічними дослідженнями для обґрунтування та встановлення особливостей та відмінностей антиоксидантної активності мелатоніну при взаємодії з супероксид-аніон-радикалом і гідроксил-радикалом з метою прогнозування шляхів створення нових лікарських препаратів на основі фармакологічної активності мелатоніну в умовах коронавірусної інфекції для його клінічного застосування при COVID-19.

Література

1. *Matichur VI, Nosivets DS, Homyak EV Melatonin kak vspomogatelnaya terapiya pro COVID-19 [Melatonin as an adjuvant therapy for COVID-19]. Naukovo-praktichniy zhurnal «Simeyna meditsina». 2020; 3(89):1-7 (Russian).*
2. *Kuznetsova TY, Solovyova NV, Solovyov VV, Kostenko VO. Antioxidant activity of melatonin and glutathione interacting with hydroxyl and superoxide anion radicals. Ukr. Biochem. J. 2017; 89, 6:22-30.*
3. *Shapoval GS, Kuznetsova TY, Solovyov VV, Kruglyak OS. Elektrohimičeskoe*

issledovanie antioksidantnyih svoystv melatonina [Electrochemical study of the antioxidant properties of melatonin]. Dopovidi NAN Ukraini. 2009; 9:160–164. (Russian).

4. Solovyova NV, Kuznetsova TY. *Quantum chemical modeling of antioxidant activity of glutathione interacting with hydroxyl- and superoxide anion radicals. Ukr. Biochem. J. 2015; 87, 2:156-162.*

УДК 004.94:534.16

С.О. Заїка, аспірантка,
Інститут фізики НАН України
А.Т. Лобурець, к.ф.-м.н., доцент,
Національний університет
«Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»

УТВОРЕННЯ ДВОВИМІРНИХ СТРУКТУР ТА КООПЕРАТИВНІ ЕФЕКТИ В АДСОРБОВАНИХ СУБМОНОШАРОВИХ ПЛІВКАХ: ГІПОТЕЗИ Й ЕКСПЕРИМЕНТИ

Метою наших наукових пошуків є встановлення фізико-хімічних закономірностей, що проявляються в процесі поверхневої дифузії в субмоношарових адсорбованих плівках на поверхні кристалів тугоплавких металів. Всі ці об'єкти з точки зору термодинаміки є нерівноважними і відкритими системами. До них без застережень можна застосувати основні положення синергетики. В досліджуваних об'єктах у процесі еволюції відбувається зниження ентропії як наслідок структуризації плівки. Дійсно, як показують виконані нами експериментальні роботи і результати комп'ютерних експериментів по вивченню еволюції створених нами математичних моделей, процеси самоорганізації за певних умов проявляються надзвичайно яскраво і різноманітно в кооперативних ефектах у процесах двовимірної дифузії залежно від індивідуальних особливостей адсорбційних систем та термодинамічних умов. Одним з найбільш цікавих і важливих для практичного застосування об'єктів нелінійної фізики є хвилі солітонного типу. Вони є яскравим прикладом локалізації енергії у двовимірній системі. Зростає інтерес до дискретних нелінійних систем і утворення динамічних солітонів [1, 2].

Натурні експерименти, теоретичне обґрунтування одержаних результатів, вироблення робочих гіпотез у разі неможливості одержання деяких результатів за допомогою прямих експериментів та їхня верифікація здійснювалася в комп'ютерних моделях, побудованих нами на молекулярному рівні з урахуванням реальних значень потенціалів латеральної взаємодії.

Експериментальне вивчення кооперативних властивостей до сьогодні залишається достатньо складною в плані технічної реалізації задачею. Основна проблема полягає складнощях реєстрації багаточастинкових ефектів, які протікають з величезними швидкостями [2]. Це робить їх вивчення у натурних експериментах практично неможливим. Такі явища як рух краудіонів і солітонів, коливання нелінійної локалізованої моди або рекомбінація вакансій і міжвузловинних атомів відбуваються з фемтосекундними швидкостями. У цьому випадку дуже ефективним