

УДК 577

Д.Е.Сивоконь (4 курс, каф. БФ), П.П.Якуцени, д.б.н., проф.

БИОЛОГИЧЕСКИ ВАЖНЫЕ КОНФОРМАЦИИ АНТИОКСИДАНТОВ

Антиоксиданты – важнейший класс биологически активных соединений, защищающих от свободных радикалов, неизбежно образующихся в процессе химических реакций. К ним относится широкий ряд веществ, разделяемых на гидрофобные, представителем которых является, к примеру, токоферол, и гидрофильные, такие как аскорбиновая кислота. В последнее время большое внимание привлекают к себе природные соединения – флавоноиды, которые нельзя однозначно отнести ни к гидрофильным, ни к липофильным веществам. Дополнительный интерес вызван тем, что, кроме антиоксидантной функции, они часто демонстрируют противовоспалительную и противоопухолевую активности. Методами молекулярной механики найдены конформации 42 флавоноидов. Проведено структурно – конформационное сопоставление рассматриваемых веществ с представителями других классов антиоксидантов. Найдена зависимость типа структура – активность.

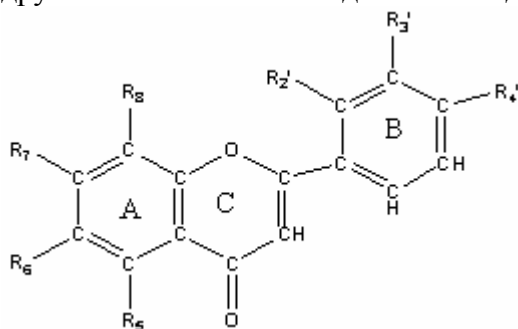


Рис. 1. Структурная формула флавоноидов

Типичная структура флавоноидов представлена на рис. 1. Показано, что вращение колец В и С друг относительно друга происходит практически свободно и мало зависит от характера заместителей. Предпочтительный угол разворота колец составляет около 30°. По литературным данным считается, что для антиоксидантной активности большое значение имеют заместители в положениях 3' и 4'. В результате выполненных нами работ подтверждена важность заместителя R_{3'}. Данные о важности R_{4'} не нашли

подтверждения. Показано, что выделение базовой пары R_{3'} и R_{6'} является более эффективным направлением поиска зависимостей структура – активность. Установлено, что фактором, определяющим повышение антиоксидантной активности, является сочетание объемности, гидрофобности и электронно-донорных свойств.

Полученные результаты обсуждаются в свете возможной классификации антиоксидантов как веществ, различающихся по месту и механизму своего биологического действия.

В настоящее время антиоксиданты, такие как флавоноиды, танины, терпены и другие, получают путем выделения из природных источников. Отмечается, что выполнение настоящей работы определяет перспективы получения биологически важных соединений синтетическим путем. При этом возникает дополнительная возможность модификации с целью усиления активности.