

decompensated LP, that is accompanied by the exhaustion of antioxidant (AO) system, blood ceruloplasmin growth, development of hypercoagulation changes. The administration of L-arginine in MS modeling reduces the symptoms of dyslipoproteinemia producing no significant effect on cholesterol and triacylglycerol levels and insulin sensitivity, suppresses lipid peroxidation, limits the extent of hypercoagulation changes.

УДК 544.14:577.1

Соловейова Н.В.

## АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ МЕЛАТОНІНУ І ГЛУТАТІОНУ НА ОСНОВІ ПОРІВНЯЛЬНОГО АНАЛІЗУ РЕЗУЛЬТАТІВ КВАНТОВОХІМІЧНИХ ТА ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

ВДНЗУ «Українська медична стоматологічна академія», м. Полтава

*Для зменшення негативного впливу вільних радикалів на біологічні об'єкти живого організму останнім часом у практичній медицині широко застосовуються ендогенні 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 біохімічних процесів на молекулярному рівні методами квантової хімії з подальшим аналізом результатів виконаних розрахунків. Тому представляється актуальним вивчення ефективності дії ендогенних антиоксидантів мелатоніну і глутатіону шляхом моделювання механізму їх взаємодії із вільними радикалами методами квантової хімії в поєднанні з експериментальними методами, зокрема, електрохімічним. Встановлена кореляція зміни макроскопічних параметрів процесу електро-відновлення активних форм кисню в присутності мелатоніну і глутатіону (потенціал та граничний струм хвиль відновлення) з отриманими на нанорівні результатами квантовохімічних досліджень (перерозподіл електронної густини, порядки зв'язків між атомами, енергетичних характеристик) при взаємодії молекул антиоксидантів із вільними радикалами, що дає можливість не тільки отримати обґрунтування позитивного ефекту використання антиоксидантів, але й встановити потенційну значущість цих речовин як лікарських засобів.*

Ключові слова: антиоксиданти, мелатонін, гідроксил-радикал, глутатіон

### Вступ

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. Вони також володіють, в залежності від ситуації, мутагенною, канцерогенною або цитостатичною дією на організм людини, що призводить до розвитку різних патологічних станів (канцерогенез, атеросклероз, хронічні запалення, нервові дегенеративні захворювання та ін.). Тому для систематизації негативного впливу ВР на організм людини останнім часом у практичній медицині широко застосовуються антиоксиданти (бета-каротин, вітаміни С і Е, селен та ін.).

Особливе місце в ряду антиоксидантів займає гормон епіфізу – мелатонін (MLT) – N-ацетил-5-метокситриптамін ( $C_{13}H_{16}N_2O_2$ ), який, на думку авторів [1-4], є більш ефективним антиоксидантом на відміну від бета-каротину, вітамінів С і Е, селену та інших. Із великого переліку робіт, присвячених вивченню мелатоніну, слід відмітити цікаве повідомлення про те, що

MLT може слугувати «пасткою» для вільних радикалів, зокрема для гідроксил-радикала ( $\bullet OH$ ) і супероксид-аніон-радикала ( $\bullet OO^-$ ) [5]. 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. Слід відмітити широку дискусію щодо антиоксидантних властивостей [4-6] MLT, активність якого порівнюють з активністю трипептида глутатіона (GSH), причому не на користь останнього [5]. Незважаючи на те, що з redox-реакціями, активністю в тканинах різних органів глутатіону пов'язують цілий ряд патологій, таких як цукровий діабет, хвороби Альцгеймера, Паркінсона та інші [7, 8]. Причому, згідно з багатьма припущеннями, це обумовлено «перекисною модифікацією», «поперечною зшивкою», а також деградацією білкових макромолекул, до складу яких входить глутатіон, а протікання таких перетворень білка відбувається переважно завдяки оборотному

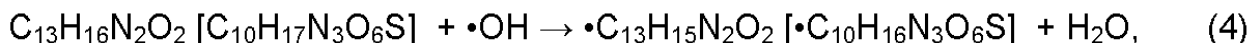
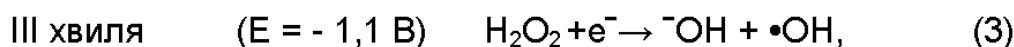
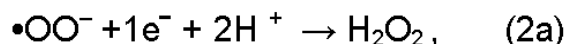
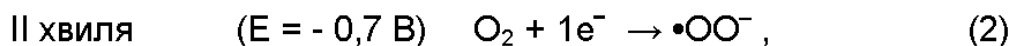
окисленню - відновленню сульфгідрильної групи глутатіону [9].

Такий висновок є недостатньо коректним, оскільки в публікаціях немає даних порівняльних досліджень антиоксидантної активності цих сполук в однакових умовах і на молекулярному рівні. Можливість такого моделювання була встановлена нами раніше за результатами квантовохімічного моделювання [10, 11]. Отримані результати наближають до більш глибокого розуміння механізму процесів, які протікають *in vivo* за участю GSH і MLT, проте не дають прямої відповіді про їх антиоксидантну активність. З нашої точки зору, досить коректно судити про порівняльну антиоксидантну активність MLT і GSH можна тільки на підставі вивчення реакцій каталітичного окислення цих сполук киснем і його активними формами, при утворенні останніх *in vitro* в умовах, що моделюють "кисневий стрес" організму. Тому, видається доцільним вивчення механізму взаємодії цих антиоксидантів із вільними радикалами  $\bullet\text{OH}$  та  $\bullet\text{OO}^-$  методами електрохімії, що на наш погляд дасть можливість як отримати дані про позитивний ефект їх застосування, так і встановити їх потенційну значущість використання при створенні нових лікарських препаратів.

Мета роботи: вивчення реакцій каталітичного окислення мелатоніну і глутатіону активними формами кисню (АФК) в однакових умовах на макрорівні на основі результатів електрохімічних досліджень із послідовним їх порівняльним аналізом з нанохарактеристиками квантовохімічних розрахунків.

#### Об'єкти та методи дослідження

Одним із найдоступніших та перспективних



Криві знімали на фоні 0,1М розчину NaCl у воді (фізіологічному розчині) з подальшим титруванням фонового електроліту добавками MLT і GSH різної концентрації (рис. 1).

При введенні у фоновий розчин добавок MLT і GSH різної концентрації спостерігали появу трьох хвиль. При цьому потенціал відновлення ( $\varphi$ ) першої хвилі не змінювався, що вказує на відновлення однакових за типом та формою ЕАЧ. Збільшення концентрацій добавок MLT і GSH призводить до істотного зниження граничного струму перших хвиль на вольтамперних кривих за рахунок чисто хімічної реакції інгібу-

методів визначення активності антиоксидантів є електрохімічний метод, запропонований Г.С. Шаповал в Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України [12-14], який дозволяє в імпульсному режимі одночасно генерувати активні форми кисню, вивчаючи процеси їх взаємодії із антиоксидантами на основі аналізу вольтамперограм процесу відновлення.

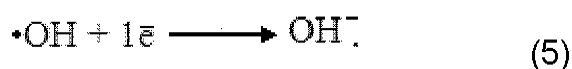
Для приготування розчину використовували L-глутатіон фірми SERVA, res. grad. та мелатонін фірми Merck (Германія). Сполуки використовували без додаткової очистки. Розчини MLT і GSH в 0,1М водному розчині NaCl (фізіологічний розчин) готували безпосередньо перед вимірюваннями. Фоновий електроліт – 0,1М розчин NaCl готували із двічі перекристалізованого NaCl марки «х.ч.» у бідисцилярній воді. Концентрація кисню у досліджуваному розчині відповідала рівноважній при атмосферному тиску і температурі 20°C. Для вилучення кисню використовували висушений аргон найвищого ступеня очистки.

#### Результати дослідження та їх обговорення

Електрохімічні дослідження, які дозволили встановити взаємозв'язок між нанохарактеристиками квантово-хімічних розрахунків і електрохімічними параметрами (потенціали відновлення електрохімічно активних частинок (ЕАЧ)), які є макрочарактеристиками, так як вони усереднені по великому ансамблю взаємодіючих частинок середовища, полягали в отриманні диференціальних вольтамперних кривих відновлення АФК, які характеризують реакції (1-3), аналогічні тим, що протікають в біосистемах в процесі дихання, обміну речовин, «кисневого стресу»:

вання 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:



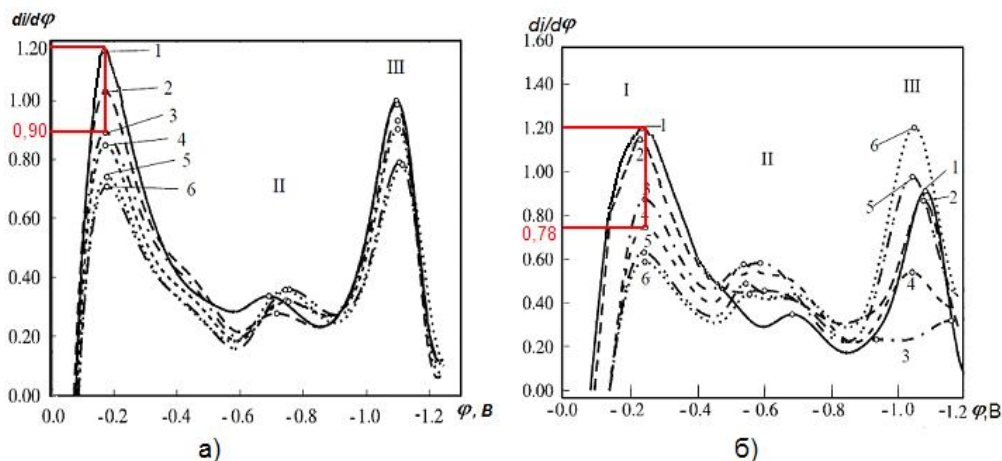


Рисунок 1 – Диференціальні вольтамперограми відновлення АФК на мідному катоді на фоні 0,1М NaCl у воді (1) в присутності різних концентрацій антиоксидантів: MLT(а): 2 – 0,39; 3 – 0,74; 4 – 1,07; 5 – 1,67; 6 – 2,18·10<sup>-3</sup> М/дм<sup>3</sup>; GSH (б): 2 – 0,24; 3 – 0,47; 4 – 0,74; 5 – 0,91; 6 – 1,1·10<sup>-3</sup> М/дм<sup>3</sup>.

Слід відмітити (рис.1), що в присутності добавок MLT і GSH з однаковою концентрацією 0,74·10<sup>-3</sup> М/дм<sup>3</sup> спостерігається значне зниження граничного струму перших хвиль відновлення, в порівнянні із фоном (відносна величина зміни піка струму в 1,7 разів більша у присутності GSH, а для MLT – приблизно в 1,2 рази), що свідчить про більш виражені антирадикальні властивості GSH в порівнянні з MLT.

На відміну від першої хвилі спостерігається катодний зсув другої хвилі потенціалу відновлення, при введенні добавок MLT, так і GSH. Так як результати квантовохімічних досліджень взаємодії •OO<sup>-</sup> з MLT та GSH не вказують на розрив водневих зв'язків в молекулах MLT і GSH, а вказують на вірогідність утворення комплексів [10], то експериментально знайдений катодний зсув потенціалу 2 хвилі відновлення для обох випадків, однозначно вказує на процес відновлення електроактивних комплексів, тип, форма і кількість яких буде визначатися концентрацією MLT і GSH відносно •OO<sup>-</sup>.

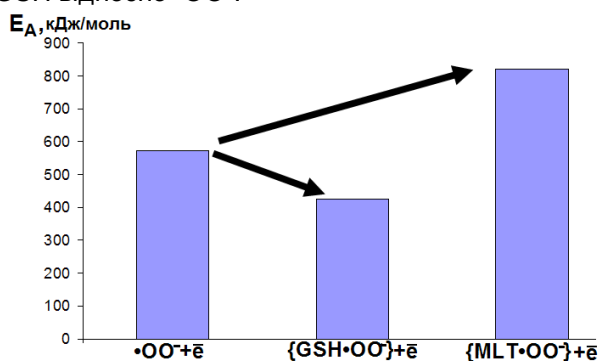


Рис.2 Зміни величин активаційних бар'єрів для •OO<sup>-</sup> та його комплексів при одноелектронному відновленні.

Зсув хвилі відновлення •OO<sup>-</sup> в присутності GSH відбувається в сторону зменшення значення потенціалу відновлення, а в присутності MLT – в бік збільшення, що підтверджує також більш виражені антирадикальні властивості GSH у порівнянні з MLT відносно •OO<sup>-</sup>. Таке обґрунтуван-

ня зсуву другої хвилі процесу одноелектронного відновлення ЕАЧ корелює із результатами квантовохімічної оцінки значень енергії активації при одноелектронному переносі заряду (рис.2), які різняться для «ізолюваної» молекули •OO<sup>-</sup> та комплексів {MLT•OO<sup>-</sup>} і {GSH•OO<sup>-</sup>}. 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 нанорівні.

Таким чином, отримані результати експерименту повністю підтвердили на макрорівні результати квантовохімічних досліджень і показали, що MLT і GSH проявляють антирадикальну активність; при цьому підтверджені більш виражені антирадикальні властивості глутатіону у порівнянні з мелатоніном [5]. Цікаво відмітити, що отриманий результат якісно співпадає з результатами медичних досліджень С.О. Бачуріна [6], представленими у вигляді феноменологічної схеми взаємодії MLT із активними формами кисню в організмі людини (рис.3).

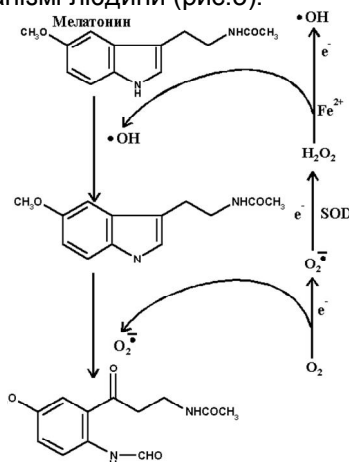


Рис.3. Схема взаємодії мелатоніну з активними формами кисню.

Таким чином, проведені електрохімічні дослідження підтвердили антирадикальні властивості мелатоніну і глутатіону, завдяки чому на макроскопічному рівні підтверджена принципова відмінність механізмів інгібування молекулами антиоксидантів гідроксил-радикалів та супероксиданіон-радикалів на фоні превалюючої антирадикальної активності глутатіону в порівнянні з мелатоніном.

Встановлена кореляція зміни макроскопічних параметрів процесу електровідновлення активних форм кисню в присутності мелатоніну і глутатіону (потенціал та граничний струм хвиль відновлення) з отриманими на нанорівні результатами квантовохімічних досліджень (перерозподіл електронної густини, порядки зв'язків між атомами, енергетичних характеристик) при взаємодії молекул антиоксидантів із вільними радикалами.

Доведена перспективність використання результатів квантовохімічних розрахунків в поєднанні з електрохімічними дослідженнями для обґрунтування та встановлення особливостей та відмінностей антирадикальної активності мелатоніну, глутатіону при взаємодії з супероксиданіон-радикалом і гідроксил-радикалом з метою прогнозування шляхів створення нових лікарських препаратів.

### Література

1. Беленичев И.Ф. Регуляция антиоксидантного гомеостаза и системы детоксикации организма гормоном мелатонином. Роль мелатонин-зависимых рецепторов в реализации этой функции / И.Ф. Беленичев, Ю.И. Губский, Е.Л. Левицкий // *Соврем. проблемы токсикологии*. – 2003. – № 2. – С. 2–16.
2. Малиновская Н.К. Роль мелатонина в организме человека / Н.К. Малиновская // *Клиническая медицина*. – 1998. – № 10. – С. 15–22.
3. Dawson D. Integrating the actions of melatonin on human physiology / D. Dawson // *Ann. Med.* – 1998. – V. 30. – P. 95–102.
4. Кветная Т.В. Мелатонин: Роль и значение в возрастной патологии / Т.В. Кветная. – СПб.: ВМЕДА, 2003. – 256 с.
5. Russel J. Melatonin: Lowering the High Price of Free Radicals / J. Russel // *News Physiol. Sci.* – 2000. – V. 15. – P. 246–250.
6. Бачурин С.О. Медико-химические подходы к направленному поиску препаратов для лечения и предупреждения болезни Альцгеймера / С.О. Бачурин // *Вопросы медицинской химии*. – 2001. – № 2. – С. 11–25.
7. Чеснокова Н.П. Молекулярно-клеточные механизмы инактивации свободных радикалов в биологических системах / Н.П. Чеснокова, Е.В. Понукалина, М.Н. Бизенкова // *Успехи соврем. естествознания*. – 2006. – № 7. – С. 29–41.
8. Hothorn M. Structural Basis for the Redox Control of Plant Glutamate Cysteine Ligase Wachter / M. Hothorn // *Journal of Biological Chemistr.* – 2006. – № 281. – P. 27557–27565.
9. Prutz W.A. The glutathione free radical equilibrium mediating electron transfer to FE(III) – cytochrome / W.A. Prutz, J. Butler, E.J. Land // *Biophysical Chemistry*. – 1994. – № 49 (2). – P. 101–111.

### Реферат

АНТИОКСИДАНТНА АКТИВНІСТЬ МЕЛАТОНИНА І ГЛУТАТІОНА НА ОСНОВАНІ СРАВНІТЕЛЬНОГО АНАЛІЗА РЕЗУЛЬТАТІВ КВАНТОВОХІМІЧЕСКИХ І ЕЛЕКТРОХІМІЧЕСКИХ ІССЛЕДОВАНИЙ  
Соловьева Н.В.

Ключевые слова: антиоксиданты, мелатонин, гидроксил-радикал, глутатион.

Для уменьшения негативного влияния свободных радикалов на биообъекты и живые организмы широко применяют эндогенные антиоксиданты, которые участвуют в системе защиты организмов от агрессивного воздействия свободных радикалов. Отсутствие систематических исследований, особенно на молекулярном уровне, антирадикальной активности различных антиоксидантов при их взаимодействии со свободными радикалами в биосистемах обуславливают не только наличие противоречивых оценок в интерпретации экспериментально полученных закономерностей, но и создают трудности в развитии общих представлений о механизме взаимодействия антиоксидантов со свободными

10. Кузнецова Т.Ю. Моделирование антиоксидантных свойств мелатонина и глутатиона при взаимодействии с гидроксил-радикалом / Т.Ю. Кузнецова, Н.В. Соловьева // *Вісник ВДНЗУ «Українська стоматологічна академія»*. – 2012. – Т. 12, Вип. 1–2. – С. 189–193.
11. Кузнецова Т.Ю. Моделирование антирадикальных процессов с участием глутатиона в биологических системах / Т.Ю. Кузнецова, Н.В. Соловьева // *Вісник ВДНЗУ «Українська стоматологічна академія»*. – 2014. – Т. 14, Вип. 4 (48). – С. 201–204.
12. Громовая В.Ф. Исследование антирадикальной и антиокислительной активности биологически активных карбоновых кислот / В.Ф. Громовая, Г.С. Шаповал, И.Е. Миронюк // *Журн. общей химии*. – 2002. – Т. 72, Вып. 5. – С. 828–831.
13. Шаповал Г.С. Вольтамперометрическое исследование каталитических redox процессов с участием аминокислот / Г.С. Шаповал, И.Е. Миронюк, В.Ф. Громовая [и др.] // *Катализ и нефтехимия*. – 2006. – Т. 14. – С. 43–47.
14. Шаповал Г.С. Электрохимическое моделирование редокс реакции глутатиона / Г.С. Шаповал, И.Е. Миронюк, В.Ф. Громовая [и др.] // *Журнал общей химии*. – 2008. – № 12. – С. 2040–2044.

### References

1. Belenichev Y.F. Rehuliyatsiya antyoksydantnoho homeostaza y systemy detoksykatsyy orhanyzma hormonom melatonynom. Rol melatonyn-zavysnykh retseptorov v realizatsyyi ztoy funktsyy / Y.F. Belenichev, Yu.Y. Hubskey, E.L. Levytskyi // *Sovrem. problemy toksykologyy*. – 2003. – № 2. – P. 2–16.
2. Malynovskaia N.K. Rol melatonyna v orhanyzme cheloveka / N.K. Malynovskaia // *Klynycheskaia medytyna*. – 1998. – № 10. – P. 15–22.
3. Dawson D. Integrating the actions of melatonin on human physiology / D. Dawson // *Ann. Med.* – 1998. – V. 30. – P. 95–102.
4. Kvetnaia T.V. Melatonyn: Rol y znachenyie v vozrastnoi patologyyi / T.V. Kvetnaia. – SPb.: VMEDA, 2003. – 256 s.
5. Russel J. Melatonin: Lowering the High Price of Free Radicals / J. Russel // *News Physiol. Sci.* – 2000. – V. 15. – P. 246–250.
6. Bachuryr S.O. Medyko-khymycheskye podkhody k napravlenomu poysku preparatov dlia lecheniya y preduprezhdeniya bolezny Altsheimera / S.O. Bachuryr // *Voprosy medytynskoi khymyy*. – 2001. – № 2. – P. 11–25.
7. Chesnokova N.P. Molekuliarno-kletochnye mekhanyzmy ynaktyvatsyy svobodnykh radykalov v byolohycheskykh systemakh / N.P. Chesnokova, E.V. Ponuskalyna, M.N. Byzenkova // *Uspekhy sovrem. estestvoznaniya*. – 2006. – № 7. – P. 29–41.
8. Hothorn M. Structural Basis for the Redox Control of Plant Glutamate Cysteine Ligase Wachter / M. Hothorn // *Journal of Biological Chemistr.* – 2006. – № 281. – P. 27557–27565.
9. Prutz W.A. The glutathione free radical equilibrium mediating electron transfer to FE (III) – cytochrome / W.A. Prutz, J. Butler, E.J. Land // *Biophysical Chemistry*. – 1994. – № 49 (2). – P. 101–111.
10. Kuznetsova T.Iu. Modelyrovanye antyoksydantnykh svoystv melatonyna y hlutatyona pry vzaymodeystvyy s hydroksyl-radykalom / T.Iu. Kuznetsova, N.V. Soloveva // *Visnyk VDNZU «Ukrainska stomatolohichna akademiia»*. – 2012. – Т. 12, Вип. 1–2. – P. 189–193.
11. Kuznetsova T.Iu. Modelyrovanye antyradikalnykh protsessov s uchastyem hlutatyona v byolohycheskykh systemakh / T.Iu. Kuznetsova, N.V. Soloveva // *Visnyk VDNZU «Ukrainska stomatolohichna akademiia»*. – 2014. – Т. 14, Вип. 4 (48). – P. 201–204.
12. Hromovaia V.F. Yssledovanye antyradikalnoi y antyoksydyltelnoi aktyvnosty byolohychesky aktyvnykh karboonykh kyslot / V.F. Hromovaia, H.S. Shapoval, Y.E. Myroniuk // *Zhurn. obshchei khymyy*. – 2002. – Т. 72, Вип. 5. – P. 828–831.
13. Shapoval H.S. Voltamperometrycheskoe yssledovanye katalytycheskykh redox protsessov s uchastyem amynokyslot / H.S. Shapoval, Y.E. Myroniuk, V.F. Hromovaia [y dr.] // *Katalyz y neftekhymyya*. – 2006. – Т. 14. – P. 43–47.
14. Shapoval H.S. Elektrokhymycheskoe modelyrovanye redoks reaktsyy hlutatyona / H.S. Shapoval, Y.E. Myroniuk, V.F. Hromovaia [y dr.] // *Zhurnal obshchei khymyy*. – 2008. – № 12. – P. 2040–2044.

радикалами и целенаправленного подхода к управлению этими процессами, что имеют практическое применение в медицине. Это делает задачу изучения антирадикальной активности разных антиоксидантов особенно актуальной. Исследование взаимодействия антиоксидантов со свободными радикалами требует изучения влияния большого количества разнообразных взаимосвязанных процессов, стабилизация которых в условиях экспериментов достаточно проблематична. Вместе с тем в настоящее время широко применяется моделирование различных биохимических процессов на молекулярном уровне методами квантовой химии с последующим анализом результатов расчетов. Поэтому представляется актуальным изучение эффективности эндогенных антиоксидантов мелатонина и глутатиона путем моделирования механизма их взаимодействия со свободными радикалами методами квантовой химии, с применением экспериментальных методов, например, электрохимическим. Установлена корреляция изменений макроскопических параметров процесса электровосстановления активных форм кислорода в присутствии мелатонина и глутатиона (потенциал и предельный ток волн электровосстановления) с полученными на наномасштабе результатами квантовохимических исследований (перераспределения электронной плотности, величин порядков связи между атомами, энергетическими характеристиками) при взаимодействии молекул антиоксидантов со свободными радикалами, что дает возможность не только получить обоснование положительного эффекта использования антиоксидантов, но и установить потенциальную значимость этих веществ в качестве лекарственных средств.

### **Summary**

ANTIOXIDANT ACTIVITY OF MELATONIN AND GLUTATHIONE BASED ON COMPARATIVE ANALYSIS OF THE RESULTS OF QUANTUM-CHEMICAL AND ELECTROCHEMICAL STUDIES

Solovieva N.V.

Key words: antioxidants, melatonin, hydroxyl radical, glutathione.

To reduce the negative impact of free radicals on biological objects and living organisms endogenous antioxidants that are involved in the body's defense against aggressive free radicals are widely used. The lack of systematic research, particularly at the molecular level, anti-radical activity of various antioxidants in their interactions with free radicals in biological systems determine not only the contradictory assessments in interpreting the experimental results, but also obstruct in developing a common understanding of the mechanism of interaction between antioxidants and free radicals and focused approach to managing these processes, which are of practical importance in medicine. Therefore the task of studying the anti-radical activity of different antioxidants is particularly relevant. Investigation of the interaction between antioxidants and free radicals requires studying the influence of a large variety of interrelated processes, stabilization of which in the experiment conditions seems to be problematic. However, currently the simulation of various biochemical processes at the molecular level by methods of quantum chemistry, followed by analyzing the results of the calculations is widely used. Therefore, it is important to study the efficiency of endogenous antioxidants as melatonin and glutathione by modelling the mechanism of their interaction with free radicals by quantum chemistry methods and electrochemical experimental methods. There is a correlation between the changes in the macroscopic parameters of the electroreduction of reactive oxygen forms in the presence of melatonin and glutathione (potential and limiting current of electroreduction wave) with those obtained at the nanoscale quantum research results (redistribution of the electron density, value of the order between the atoms, the energy characteristics) under the interaction between antioxidant molecules and free radicals, which makes it possible not only to substantiate positive effect of using antioxidants, but also to establish the potential importance of these substances as medication.