

ском электронном уровне не только получить данные о положительном эффекте их применения, так и установить потенциальную значимость использования, как лекарственных препаратов.

Важным также является перспективность квантово-химических расчетов для правильной передачи особенностей взаимодействия некоторых классов биологических молекул с целью научно обоснованного синтеза в дальнейшем химико-фармацевтических препаратов [17, 18].

Цель работы: изучение механизма взаимодействия молекул мелатонина и глутатиона с гидроксил-радикалами на основании результатов квантово-химических расчетов.

Объекты и методы исследований

Изучение механизма взаимодействия МЛТ и GSH с гидроксил-радикалом проводилось путем квантово-химических неэмпирических расчетов с применением пакета программ GAMESS (версия от 27 марта 2007 года) с использованием гаусовских базисных наборов: в валентно-расщепленном базисе Хузинаги в неограниченном приближении Хартри-Фока-Рутана метода ССП МО ЛКАО в этой работе применялись оптимизированные геометрии молекул МЛТ [19] и GSH [20], впервые установленные нами. Из числа активных форм кислорода (АФК) объектом изучения был взят гидроксил-радикал ($\cdot\text{OH}$), с

предварительно проведенной оптимизацией геометрического строения ($R_{(\text{OH})} = 0,0987 \text{ нм}$ [19]).

Результаты и их обсуждение

На основании результатов поиска минимума потенциальной энергии, отвечающих максимуму взаимодействия гидроксил-радикала с молекулой GSH, для моделирования общих закономерностей антиоксидантных свойств глутатионами было выделено 5 наиболее глубоких из 16 обнаруженных, что позволило определить основные "направления атаки" гидроксил-радикала (рис.1) на молекулу GSH. Пунктиром на рис.1 представлены значения энергии связей взаимодействий МЛТ...он для пяти наиболее глубоких минимумов из 16 обнаруженных нами ранее [19]. Такое наложение кривых для величин энергий связей взаимодействий GSH...он МЛТ...он не только дает полную наглядность полученных результатов расчета для 5 наиболее глубоких минимумов этих взаимодействий (рис.2), но и позволяет, даже без дополнительного анализа предположить более высокую антиоксидантную активность глутатиона, которая идентифицируется наличием более глубоких минимумов величин ΔE , превышающие аналогичные значения для взаимодействий МЛТ с $\cdot\text{OH}$ на $(1,5+3) \text{ кДж/моль}$

Сивухин

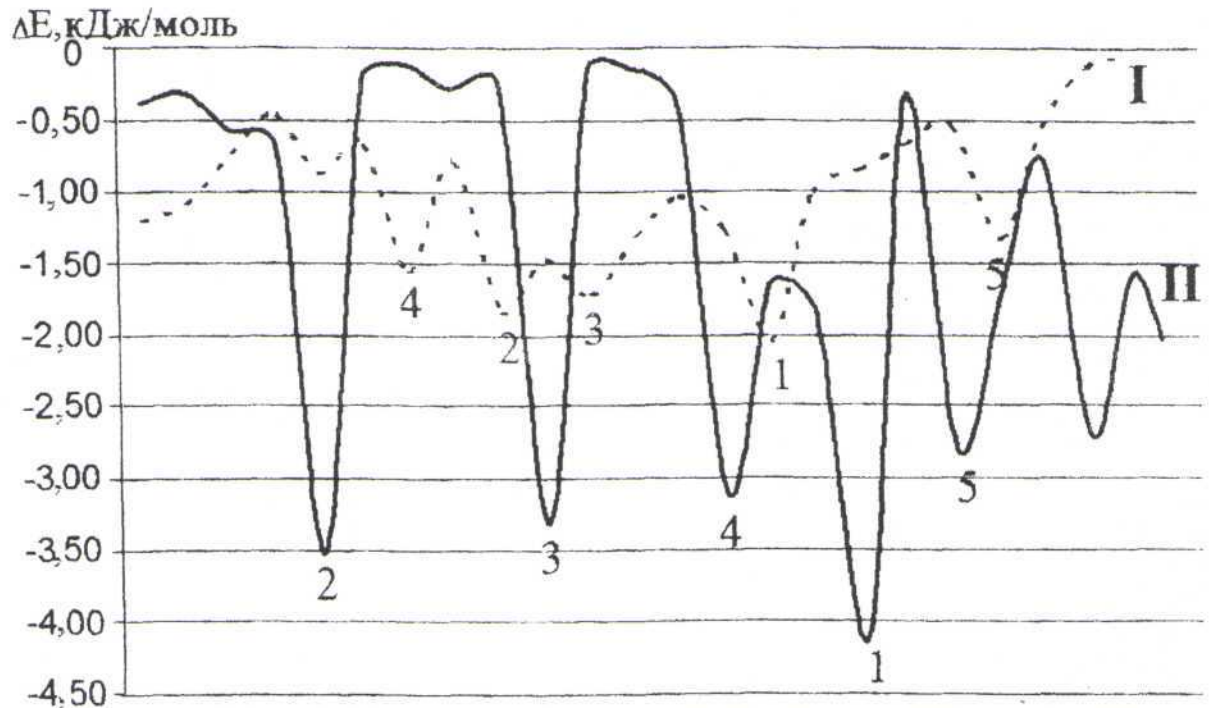


Рис.1 Изменение величин энергии связи ΔE гидроксил-радикала с антиоксидантами: а) мелатонин (I); б) глутатион (II) при движении $\cdot\text{OH}$ вдоль координаты реакции