

МОВ
УМУ
ЭКУ-
НО-
ОНА
1:1
ОС-
ИЛ-
ХОМ
ЗЕЙ
ПЕЕ
ИМЕ
ГВА-
Н И
СТЬ
БО-
ЖИЙ
ГЬ-
ЭН-
КАМ
ОК
НО-
ОН

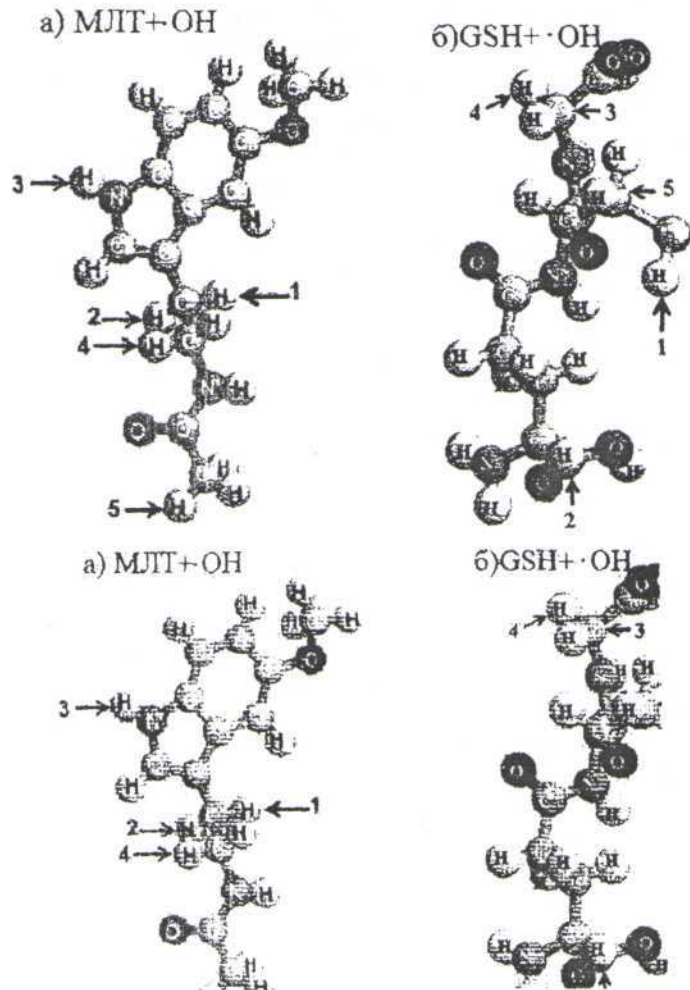


Рис. 2. Наиболее вероятные направления взаимодействия, отвечающие абсолютному (1) и локальным (2-5) минимумам энергии взаимодействия молекул антиоксидантов с гидроксил-радикалом

Сравнительный анализ результатов изменения величин порядков связей (B_j) между «внешними» атомами в молекулах МЛТ и GSH показал, что для всех пяти направлений взаимодействия он ослабляет «внешние» связи C-H и N-H молекулы МЛТ и – C-H, N-H и S-H молекулы GSH в 2-3 раза, а для положений 1 и 2, наблюдается, по данным расчета, вообще разрыв связи S-H и C-H с образованием молекулы воды, подтверждая тем самым наличие более сильных антиоксидантных свойств в молекуле GSH.

Вместе с тем представленный выше анализ был произведен для моделирования взаимодействия молекул МЛТ и GSH только с одним гидроксил-радикалом. Этот результат, в сочетании с утверждением об особой роли GSH в антиоксидантной защите организма [7,8], вызванной ред-окс реакцийми, происходящими в различных органах человека благодаря обратимой ред-окс сульфгидрильной группы глутатиона, влияющему на протекание таких болезней как сахарный диабет, болезнь Альцгеймера, Паркинсона и другие [9,10-12], стимулирует расширение направленности моделирования. Поэтому для приближения результатов расчета к реальным условиям взаимодействия молекул мела-

тонина и глутатиона с гидроксил-радикалом организме человека и моделирования ситуации изменения концентрации гидроксил-радикала относительно молекул МЛТ и GSH, нами было предпринято расчет взаимодействия молекул тиоксидантов с пятью гидроксил-радикалами одновременно в местах, которые соответствуют положениям минимумов энергии взаимодействия молекул МЛТ и GSH со свободным радикалом (рис.3).

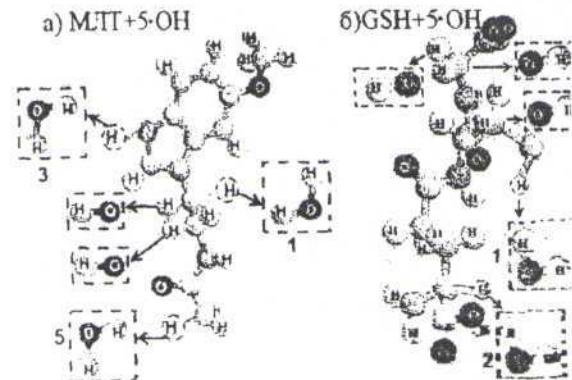


Рис. 3. Концептуальная схема взаимодействия молекул антиоксидантов с гидроксил-радикалами в местах минимума энергии