

Анализ данных в табл. 2 показывает, что взаимодействие одновременно пяти гидроксил-радикалов с молекулой GSH также способствует ослаблению, однако более «мягкому», «внешних» связей C-H, N-H и S-H антиоксиданта в положениях 1 и 2, которое, по видимому, вызвано особой ролью сульфгидрильной группой GSH [10] в антиоксидантной и антирадикальной за-

щите организма человека. Для всех направлений взаимодействия с молекулой МЛТ наблюдается существенное, но не одинаковое ослабление связей в положениях 2,4 на фоне сильного ослабления (-9+10 раз) в положениях 1,3,5, что стимулирует отрыв трех атомов водорода.

Изменение величин оптимизированных расстояний (R) и порядков связей ( $V_{ij}$ ) между атомами при взаимодействии молекул МЛТ и GSH с одним гидроксил-радикалом (выборочные данные)

Взаимодействие	№ п/п	R · 10 <sup>10</sup> , м		$\Delta R \cdot 10^{10}$ , м	$V_{ij}$		$\Delta V_{ij}$	
		До реакции	После реакции		До реакции	После реакции		
МЛТ .....он	1	МЛТ С-Н	1.088	4.42	3.332	0.819	0.034	-0.585
		СР Н-О	0.987	0.975	-0.012	0.837	0.805	-0.032
	2	МЛТ С-Н	1.088	4.649	3.561	0.944	0.052	-0.892
		СР Н-О	0.987	0.977	-0.01	0.837	0.807	-0.03
	3	МЛТ N-H	0.999	1.960	0.961	0.933	0.086	-0.867
		СР Н-О	0.987	0.970	-0.017	0.837	0.844	-0.007
	4	МЛТ С-Н	1.080	3.119	2.031	0.931	0.088	-0.863
		СР Н-О	0.987	0.971	-0.016	0.837	0.845	0.008
	5	МЛТ С-Н	1.088	3.367	2.279	0.843	0.092	-0.751
		СР Н-О	0.987	0.971	-0.016	0.837	0.819	-0.018
GSH .....он	1	GSH S-H	1.871	4.235	2.256	0.938	-	-
		СР Н-О	0.987	0.970	-0.017	0.837	0.823	-0.014
	2	GSH С-Н	1.134	3.254	2.12	0.921	-	-
		СР Н-О	0.987	0.973	-0.014	0.837	0.819	-0.018
	3	GSH N-H	1.128	1.082	-0.046	0.906	0.873	-0.044
		СР Н-О	0.987	0.992	0.005	0.837	0.762	-0.075
	4	GSH С-Н	1.131	1.083	-0.048	0.917	0.871	-0.046
		СР Н-О	0.987	0.988	0.001	0.837	0.822	-0.015
	5	GSH С-Н	1.137	1.085	-0.052	0.833	0.855	0.022
		СР Н-О	0.987	1.000	0.013	0.837	0.761	-0.071

Изменение расстояний (R) и порядков связи ( $V_{ij}$ ) между атомами при взаимодействии молекул мелатонина и глутатиона с пятью гидроксил-радикалами (выборочные данные)

Взаимодействие	№ п/п	R · 10 <sup>10</sup> , м		$\Delta R \cdot 10^{10}$ , м	$V_{ij}$		$\Delta V_{ij}$	
		До реакции	После реакции		До реакции	После реакции		
МЛТ .....он	1	С-Н	1.088	2.79	1.702	0.619	0.098	-0.52
	2	С-Н	1.088	1.077	-0.011	0.944	0.883	-0.06
	3	N-H	0.999	2.038	1.039	0.933	0.086	-0.8
	4	С-Н	1.080	1.088	0.008	0.931	0.894	-0.0
	5	С-Н	1.088	2.360	1.027	0.843	0.069	-0.7
GSH .....он	1	S-H	1.871	2.344	0.673	0.938	0.055	-0.8
	2	С-Н	1.134	2.828	1.694	0.921	-	-
	3	N-H	1.128	1.470	0.342	0.906	0.745	-0.
	4	С-Н	1.131	1.081	-0.050	0.917	0.944	0.0
	5	С-Н	1.137	1.075	-0.062	0.833	0.869	0.0

При этом главным результатом взаимодействия гидроксил-радикала с молекулами МЛТ и GSH следует считать наличие существенных антиоксидантных свойств мелатонина и глутатиона, больших естественно у глутатиона, которые проявляются в ослаблении «внешних» связей атомов по преобладающим направлениям взаимодействия, отвечающим минимальным значениям энергии.

#### Выводы

1. На основании результатов квантово-химического моделирования взаимодействия молекул мелатонина и глутатиона с гидроксил-радикалом установлен микроскопический механизм антирадикальной активности этих молекул.

2. Предложенная концептуальная схема изменения межатомных связей между «внешними» атомами антиоксидантов под воздействием свободного радикала «он», которая позволяет установить наиболее вероятные активные направления протекания ред-окс реакций, обуславливающие антиоксидантную активность МЛТ и GSH.

3. Установлен приоритет антирадикальной активности GSH в сравнении с таковой МЛТ, вызванный разрывом «внешних» связей N и S-H в молекуле глутатиона.

4. Моделирование эффекта увеличения концентрации гидроксил-радикала относительно молекул GSH и МЛТ (5:1) принципиально выявляет обнаруженный механизм, что указывает на инвариантность протекания таких реакций.