

Рис.1. До реакции

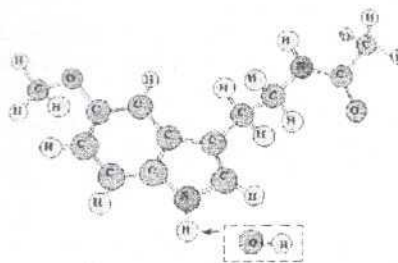


Рис.2. После реакции

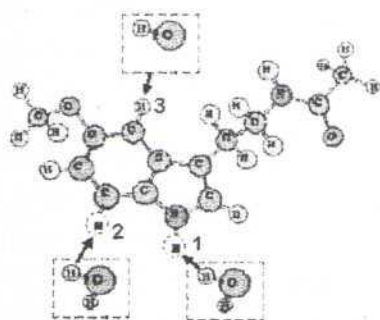


Рис.3. До реакции

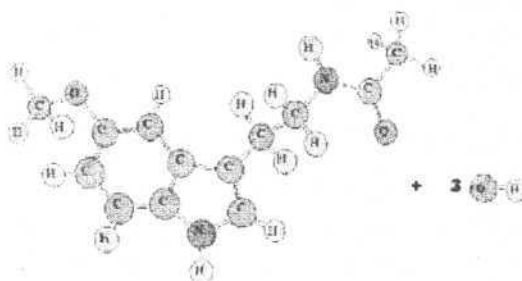


Рис.4. После реакции

Как показали расчеты, два свободных гидроксил радикала стимулируют отрыв соответствующих 2 атомов водорода, которые присоединяются к молекулам свободных радикалов с образованием молекул воды в двух положениях с разрывом связей С-Н, N-H (атом 1, 2), а третий ослабляет связь С-Н (атом 3), (рис.4).

Для подтверждения полученных теоретических результатов была проведена попытка определить эффективность и исследовать механизм антиоксидантного действия мелатонина *in vitro* в водном физиологическом растворе, путем электрохимического генерирования гидроксильных радикалов и перекиси водорода в присутствии этого гормона, используя установленную ранее возможность моделирования таким способом взаимодействие с АФК [2].

В ходе работы была получена вольтамперограмма восстановления кислорода на медном электроде в фоновом растворе 0,1М NaCl и в присутствии мелатонина, что позволило подтвердить обнаруженную с помощью квантово-химических расчетов антирадикальную активность мелатонина по его непосредственному влиянию на волны восстановления гидроксильных радикалов и установить антиоксидантное действие по его влиянию на волны электровосстановления перекиси водорода.

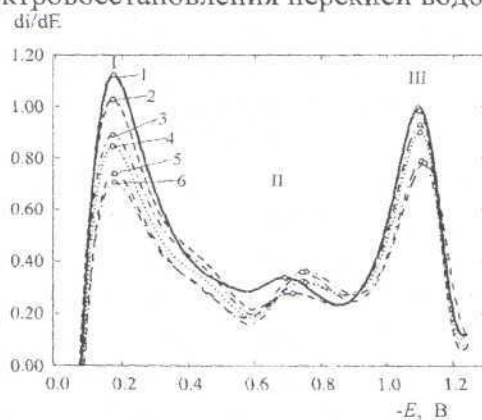


Рис.5. Дифференциальные вольтамперограммы восстановления кислорода на медном катоде на фоне 0,1М NaCl в воде в присутствии различных концентраций мелатонина: 2 - 0,39; 3 - 0,74; 4 - 1,07; 5 - 1,67; 6 -  $2,18 \cdot 10^{-3}$  М/дм<sup>3</sup>.