

при зміні годинних поясів, тим самим запобігаючи розвитку десинхронозу. Він ефективний як імунomodulatory при інфекційних і ракових захворюваннях, знижує токсичність хіміотерапії. Сприяє попередженню раку молочної залози, яєчника, матки, передміхурової залози.

Мелатонін є потужним антиоксидантом, що перевершує по своїй активності глутатіон, вітамін Е, С і інші антиоксиданти. До числа основних функцій антиоксидантів можна віднести зменшення негативної дії вільних радикалів, які або надходять в організм людини, або утворюються в ньому, у ході природних процесів обміну речовин.

На збільшення кількості вільних радикалів впливають багато факторів, які залежать від стану навколишнього середовища. Серед них - промислове забруднення повітря, вихлопні гази автомобілів, двоокис сірки (вона втримується в кислотному дощі), сигаретний дим, короткохвильове видиме й ультрафіолетове випромінювання (з появою озонів діє збільшується), хімічні отрути й ін.

Вільні радикали порушують біохімічний баланс організму, а це приводить до зниження імунітету. У цілому, вільні радикали відповідальні більш ніж за 60 розповсюджених хвороб, деякі з яких можуть привести до летального результату. Антиоксиданти, які вступають у біохімічні реакції із вільними радикалами, зменшують їхній негативний вплив на організм людини.

Виходячи із цього, є доцільним застосування сучасних високоточних неспірочних квантово-хімічних розрахунків для вивчення механізму взаємодії МЛТ із вільними радикалами. Результати, яких дадуть можливість на електронному рівні одержати обґрунтування ефекту застосування МЛТ.

Вивчення механізму взаємодії молекули МЛТ і вільних радикалів проводилися шляхом квантово-хімічних досліджень неспірочних розрахунків із застосуванням пакету програми GAMESS (GAMESS версія від 5 червня 2005 року). У ролі вільних радикалів були взяті супероксид O_2^- , гідроксил радикал OH^* , перекис водню H_2O_2 .

Проведені розрахунки дозволили визначити «напрямки атаки», які відповідають абсолютним мінімумам потенціальної енергії взаємодії вільних радикалів з молекулою МЛТ.

При проведенні аналізу було виявлено, що три точки можливого «місця атаки» молекули МЛТ із молекулами O_2^- , OH^* , H_2O_2 співпадають, що в свою чергу визначило «активні центри» взаємодії МЛТ із вільними радикалами. Як показали розрахунки стимулює відрив атома кисню, який приєднується до вільного радикалу із утворенням молекули води. На відміну від гідроксил радикалу супероксид не відриває атом водню від молекули МЛТ, і цим вказує на відмінність механізму взаємодії, пояснюючи більшу реактивність і токсичність OH^* у порівнянні із су перексидом [1, с. 129-131].

На рисунках 1 і 2 показаний один із варіантів взаємодії молекул МЛТ і гідроксил радикала.

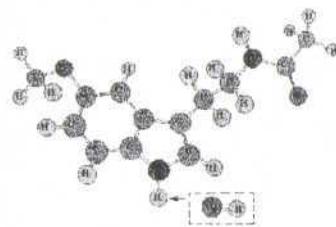


Рис. 1 До реакції

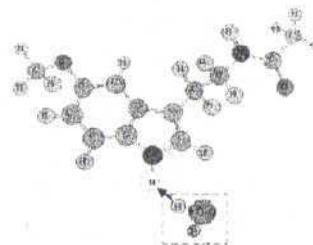


Рис. 2. Після реакції

Для наближення результатів розрахунку до реальних процесів взаємодії мелатоніну із вільними радикалами в організмі людини і моделювання ситуації зміни концентрації МЛТ відносно вільних радикалів нами був проведений розрахунок взаємодії одночасно трьох молекул гідроксил радикалу із молекулою МЛТ (рис. 3, рис. 4).

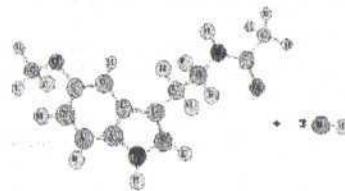


Рис. 3 До реакції

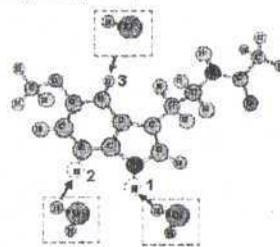


Рис. 4. Після реакції

Як показали розрахунки, два вільних гідроксил радикали стимулюють відрив відповідних 2 атомів водню, які приєднуються до молекул вільних радикалів із утворенням води у двох положеннях із розривом зв'язку С-Н, N-Н (атом 1, 2), а третій послаблює зв'язок С-Н (атом 3), (рис. 4).

Для підтвердження отриманих теоретичних результатів були проведені досліди для визначення ефективності і дослідження механізму антиоксидантної дії мелатоніну *in vitro* у водному фізіологічному розчині, шляхом електрохімічного генерування гідроксильних радикалів і перекисню водню у присутності цього гормону, використовуючи установлену раніш можливість [2, с. 92-94], моделювання таким чином взаємодію із вільними радикалами.

У ході роботи була отримана вольтамперограма відновлення кисню на мідному електроді у фоновому розчині 0,1М NaCl і в присутності мелатоніну [3, с. 159-164]. Що дозволило підтвердити отриману за допомогою квантово-хімічних розрахунків антирадикальну активність мелатоніну по його безпосередньому впливу на хвилі відновлення гідроксильних радикалів і встановити антиоксидантну дію по його впливу на хвилі електровідновлення перекисню водню.