

**ІНСТИТУТ БІООРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ТА НАФТОХІМІЇ
ім. В.П. КУХАРЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ**

**БІОАКТИВНІ СПОЛУКИ,
НОВІ РЕЧОВИНИ
І МАТЕРІАЛИ**

**За загальною редакцією
А.І. Вовка**

**Київ
Інтерсервіс
2024**

УДК 54.06, 54-126, 54-127, 541.124, 541.183, 544.02, 544.6, 547-305, 547.321, 547.722, 547.74, 547.775, 547.783, 547.8, 547.859, 551.52, 577.1, 577.112.083, 577.17.02, 581.1, 581.19, 615.281, 615.9, 621.763, 661.63, 665.372, 665.9, 678, 678.562, 678.664

Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / За загальною ред. А.І. Вовка – Київ: Інтерсервіс, 2024. – 306 с.

У книзі представлено роботи співробітників Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України, а також науковців інших інститутів та університетів за матеріалами XXXIX наукової конференції з біоорганічної хімії та нафтохімії (30 травня 2024 р., м. Київ). Наукові статті за тематикою з біоорганічної хімії, органічної хімії, нафтохімії, хімії високомолекулярних сполук зібрано у два розділи. У першому розділі подано результати синтезу нових органічних сполук, дослідження їх реакційної здатності та біологічної активності, а також взаємозв'язку між структурою і активністю. У другому розділі представлено наукові розробки, що стосуються нових полімерних композицій різного призначення з покращеними цільовими характеристиками, паливних і мастильних матеріалів, каталізаторів олеохімічних перетворень і переробки антропогенних відходів. Книга призначена для широкого кола фахівців у галузі хімії та біології, а також аспірантів і студентів.

Рекомендовано до друку Вченою радою Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України (протокол № 8 від 27.06.2024 р.)

Рецензенти

Доктор медичних наук В.В. Жирнов
Доктор хімічних наук, професор Л.К. Патриляк

ISBN 978-966-999-459-2

ІБОНХ ім. В.П. Кухаря НАН України, 2024

***IN VITRO* АНТИРАКОВА ОЦІНКА ТА *IN SILICO* ВИВЧЕННЯ 1,3-ТІАЗОЛ-2-ІЛ- ТА 1,3-ТІАЗОЛ-5-ІЛВМІСНИХ РОДАНИНІВ**

¹Синенко В.О., ²Оберніхіна Н.В., ¹Качковський О.Д., ¹Броварець В.С.

¹Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України,

²Національний медичний університет імені О.О. Богомольця

nataliya.obernikhina@gmail.com

In vitro дослідження протиракової активності ізомерних 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісних похідних роданіну демонструють різний ступінь інгібування росту клітин, причому 1,3-тіазол-2-ілвмісний ізомер проявляє вищу активність. Подальші *in silico* дослідження молекулярної будови та природи такого типу π -спряжених систем показали, що фрагменти тіазолу і роданіну в структурі тіазол-2-ілвмісного ізомеру розташовані в просторі під кутом 45° . Вірогідність утворення $[\pi-\pi]$ комплексів 1,3-тіазол-2-ільного ізомеру вища, ніж 1,3-тіазол-5-ільного, що добре узгоджується з дослідженнями їх протиракової активності.

Ключові слова: 1,3-тіазоли, роданіни, антиракова активність, $[\pi-\pi]$ комплекси, пофрагментний підхід.

In vitro studies of the anticancer activity of isomeric 1,3-thiazol-2-yl- and 1,3-thiazol-5-yl-containing derivatives of rhodanine testify different degrees of cell growth inhibition, with the 1,3-thiazol-2-yl isomer showing better activity. Further *in silico* study of the molecular structure and nature of this type of π -conjugated systems showed that the thiazole and rhodanine fragments in the structure of 1,3-thiazol-2-yl containing isomer are situated in space at an angle of 45° . The probability of formation of $[\pi-\pi]$ complexes of the 1,3-thiazol-2-yl isomer is higher than that of 1,3-thiazol-5-yl isomer, which agrees with studies of their anticancer activity.

Keywords: 1,3-thiazoles, rhodanines, anticancer activity, $[\pi-\pi]$ complexes, fragment-to-fragment approach.

П'ятичленний гетероциклічний роданіновий цикл займає особливе місце в медичній хімії як складова багатьох сполук, що проявляють протимікробну [1], противірусну [2], протизапальну [3], антидіабетичну [4] та селективну протиракову активності [5–6]. При цьому *N*-заміщені роданіни демонструють високу активність інгібування росту клітин раку

людини як інгібітори пентозофосфатного шляху окиснення глюкози [5–6]. 5-Заміщені роданіни інгібують серин-треонінові протеїнкінази різних типів в залежності від природи замісника. Було показано, що сполуки, які містять в своєму складі гетероциклічні π -спряжені системи тіофену та роданінового циклу, демонструють високу ефективність ($IC_{50} = 1,4 \mu M$) як потенційні протилейкемічні засоби [7]. Тому наступним кроком було створення нових сполук шляхом введення в положення C2 та C5 донорного 1,3-тіазольного гетероциклу, який має внутрішню π -спряжену систему, акцепторного роданінового циклу з зовнішньою π -спряженою системою та подальше вивчення їх активності щодо інгібування росту клітин раку [8]. *In vitro* дослідження показали, що нові ізомерні 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісні похідні (ThR) демонструють різну активність щодо інгібування росту клітин раку, а *in silico* аналіз показав, що такі комбіновані гетероциклічні системи (Het) як потенційні фармакофори можуть проявляти біологічну афінність шляхом утворення стабільного [Het-BioM] комплексу з фрагментами протеїнів за різними механізмами нековалентних взаємодій [8].

У нашій роботі приведено результати дослідження взаємного впливу π -спряженого фрагменту роданіну, введеного в C2 та C5 положення 1,3-тіазолу, на фармакологічну активність нових сполук шляхом вивчення їх молекулярної будови та електронних властивостей, енергії стабілізації комплексів, використовуючи пофрагментний підхід [9] як подальше наближення стратегії FBDD (дизайн ліків на основі фрагментів) [10]. Досліджені сполуки **1** та **2** представлено на рисунку 1.

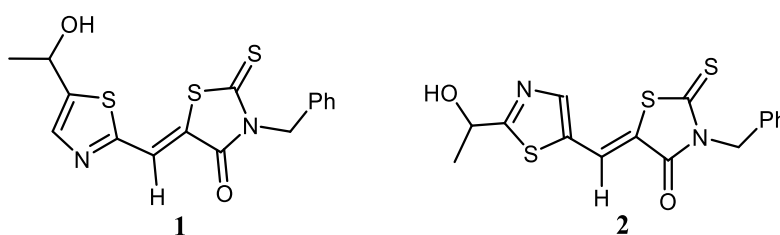


Рис. 1. Структурні формули досліджених (*Z*)-3-бензил-5-((5-(1-гідроксиетил)тіазол-2-іл)метилен)-2-тіоксотіазолідин-4-ону (**1**) та (*Z*)-3-бензил-5-((2-(1-гідроксиетил)тіазол-5-іл)метилен)-2-тіоксотіазолідин-4-ону (**2**)

Протипухлинні властивості сполук **1** і **2** були перевірені на лініях ракових клітин людини в NIH, Бетесда, Меріленд, США у рамках програми відкриття ліків NCI [11]. Первинний протипухлинний скринінг *in vitro* з однією дозою був ініційований інокуляцією клітин кожної із 60 панельних

ліній, залучених до різних видів людських пухлинних клітин, результати наведено у таблиці 1.

Як показує таблиця 1, ізомерні тіазоловмісні похідні роданіну проявляють деяку селективність по відношенню до 9-ти досліджених ліній раку людини. Найбільшу активність сполуки проявили до інгібування клітин лейкемії, раку легень, товстої кишки, нирок. Також зазначимо, що сполука **1** по кожній з ліній значно активніша, ніж сполука **2**.

Таблиця 1

Протиракова активність сполук **1** та **2**
(однодозовий скринінг 60-ти панелей ракових клітин ($C = 10^{-5}$ мол/л))

Сполука	Панель (лінія клітин), відсоток (%) росту однієї дози				
	Лейкемія (RPMI-8226)	Рак легень (NCI-H522)	Рак товстої кишки (HT29)	Рак нирок (TK-10)	Середнє значення по 60-ти панелях
1	-4,74	0,34	-8,15	-18,46	63,87
2	52,34	5,34	59,45	33,66	90,21

Щоб краще зрозуміти різну антиракову активність 1,3-тіазоловмісних похідних роданіну, розглянемо їх молекулярну будову та електронні властивості на прикладі модельних ізомерів **3** та **4** (рис. 2) з однаковими замісниками. Основні характеристики обраховані методом DFT [ω B97XD/6-311G(d,p.)] в програмному пакеті GAUSSIAN 09 [12]. Саме ω B97XD функціонал є актуальним для моделювання [Het-BioM] комплексів [13].

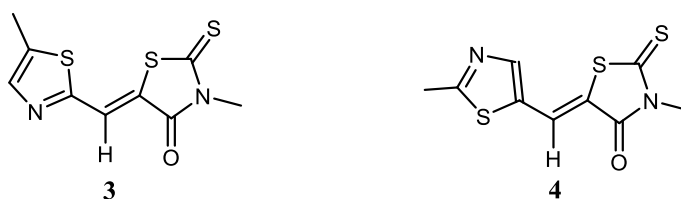


Рис. 2. Структурні формули модельних 1,3-тіазол-2-іл-*N*-метилроданіну (**3**) та 1,3-тіазол-5-іл-*N*-метилроданіну (**4**)

Відповідно до теорії збурень [14], в стабілізацію комплексів, утворених за різними механізмами міжмолекулярної взаємодії, найбільший вклад дають граничні молекулярні орбіталі (найвища зайнята МО (ВЗМО) і найнижча вакантна МО (НВМО)) обох компонентів. Відносне положення граничних орбіталей щодо рівня Фермі визначає донорні та акцепторні властивості спряжених молекул і кількісно описується параметром ϕ_0 [15].

Раніше було показано, що максимальна стабільність [Het-BioM] комплексу досягається у випадку, коли одна компонента донор, інша – акцептор [9]. Взаємне розташування та форма МО похідних досліджених сполук **3** та **4** наведено на рисунку 3.

Як показує рис. 3, ВЗМО(0) для досліджених сполук **3** та **4** є π -МО, локалізована по всій площині молекули, $E=8,1-8,3$ еВ. Тому 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісні похідні роданіну утворюватимуть π -стекові комплекси по двох компонентах молекули: ядру тіазолу з внутрішньою π -спряженою системою ([π - π] комплекс по типу К-1) та роданіновому циклу з зовнішньою π -спряженою системою ([π - π] комплекс по типу К-2) (рис. 4), величини яких зібрані у таблиці 2.

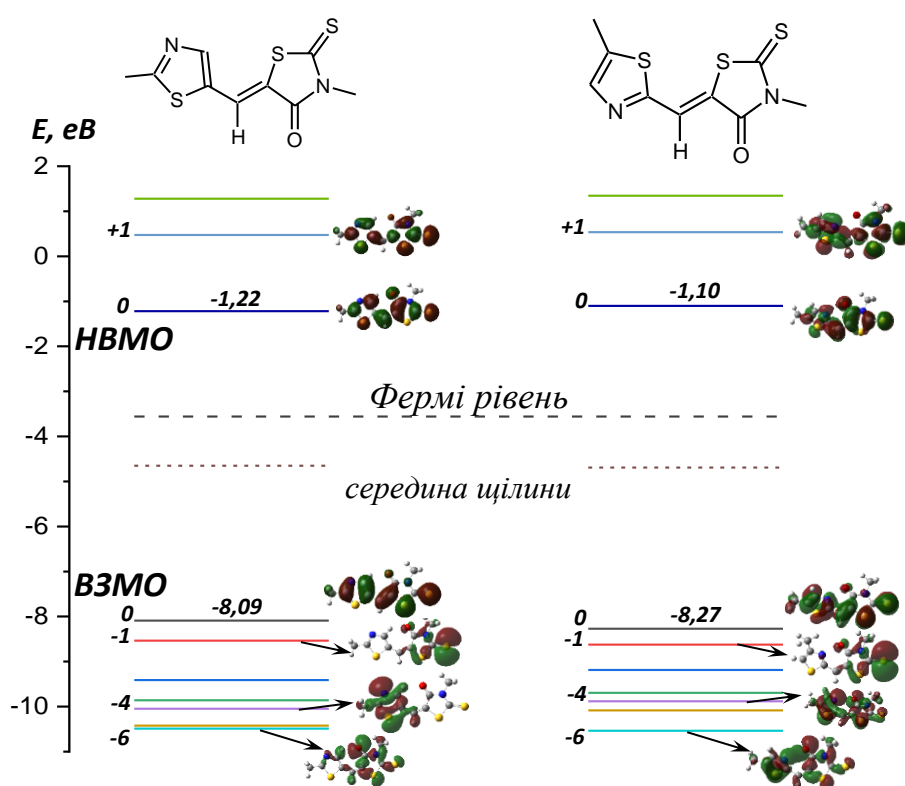


Рис. 3. Енергії та форми МО модельних 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісних похідних роданіну **3** та **4**

Оптимізація молекулярної геометрії двох ізомерів показала, що молекула 1,3-тіазол-2-ілвмісного ізомеру **3** не є плоскою: ядро 1,3-тіазолу розташоване в просторі по відношенню до роданінового циклу під кутом 45° , таким чином вірогідність утворення [Het-BioM] комплексів за механізмом π -стекової взаємодії за двома гетероциклічними системами буде вищою у порівнянні з ізомером **4**.

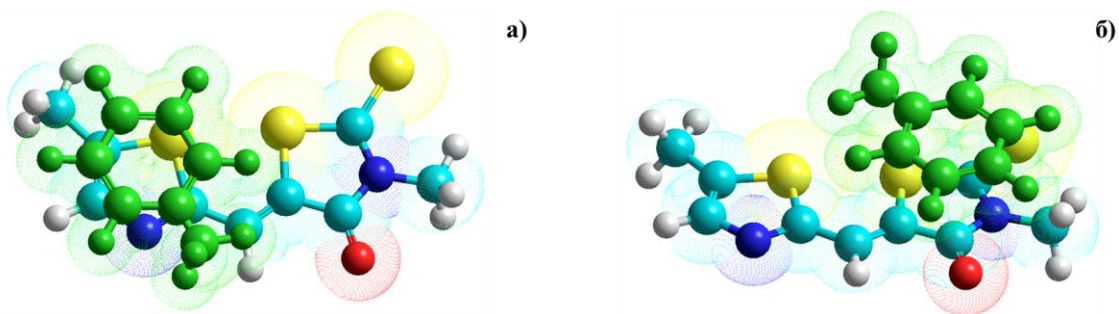


Рис. 4. [π - π] Комплекси досліджених сполук з модельним залишком фенілаланіну: а) [π - π] комплекс К-1; б) [π - π] комплекс К-2

Мішенями 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісних похідних роданіну є протеїни, що містять π -спряжений залишок амінокислот (фенілаланін, тирозин, триптофан) в активній ділянці (Ph-R), які можуть утворювати [π - π]-комплекси двох типів (див. рис. 4).

Таблиця 2

Теоретичні величини [π - π] комплексів модельних сполук **3** та **4**

тип	Енергія комплексоутворення			ϕ_0^d	μ, D	$\pi \rightarrow \pi^*$ перехід		
	$E_{mol}^a, \text{ а.о.}$	$E_{compl}^b, \text{ а.о.}$	$\Delta E^c, \text{ ккал/моль}$			$E, \text{ eV}$	$f, \text{ в.о.}$	$\lambda_t, \text{ нм}$
[Ph-R:ThR(3)] комплекс								
К-1	-1727,02918	-1998,54778	-10,63	0,32	4,46	3,52	0,79	383
К-2		-1998,54161	-13,86					
[Ph-R:ThR(4)] комплекс								
К-1	-1727,03813	-1998,55869	-8,76	0,34	3,89	3,65	0,57	380
К-2		-1998,55993	-7,98					
Ph-R	-271,53453	-	-	0,51	0,34	-	-	-

^a E_{mol} – загальна енергія стабілізації молекул;
^b E_{compl} – загальна енергія [π - π] комплексів;
^c ΔE – енергія стабілізації [π - π] комплексів за різними типами, розрахована за [15];
^d ϕ_0 – параметр біологічної афінності, розрахований за [15]

Раніше було показано [15], що залишок фенілаланіну є нейтральною π -спряженою системою, тож розглянемо пофрагментно енергії стабілізації [π - π] комплексів за різними π -спряженими гетероциклічними системами 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісних похідних **3** та **4**.

Як видно з таблиці 2, енергії стабілізації [π - π] комплексів досліджених сполук **3** та **4** по різних фрагментах різняться: якщо ΔE між фрагментами в сполуці **4** незначна ($\sim 1,2$ ккал/моль), то в сполуці **3** в два рази більша (~ 3 ккал/моль) саме через конфігурацію в просторі (ядра більш відкриті для π -стекової взаємодії); в сполуці **4** ΔE [π - π] комплексу по роданіновому

циклу на 3 ккал/моль більша, ніж по ядру 1,3-тіазолу. Обрахунок першого $\pi \rightarrow \pi^*$ переходу показав, що для сполуки **3** показник енергії осцилятора (f) на 0,22 в.о. вищий, площа перекриття електронної густини а процесі комплексоутворення дещо більша, при цьому енергії для переходу витрачається на 0,13 еВ менше. Тож, вірогідність утворення більш стабільних [Het-BioM] комплексів з активними протеїнами є вищою для сполуки **1**.

Такі теоретичні розрахунки утворення $[\pi-\pi]$ комплексів 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісних похідних **3** та **4** дають можливість припустити, що саме зміна молекулярної геометрії 1,3-тіазол-2-ілвмісного ізомеру **1** на відміну від ізомеру **2** в просторі приводить до підвищення біологічної афінності, розрахованої *in silico* у пофрагментному підході, отже, відповідає за його селективне та більш активне інгібування *in vitro* раку нирок, товстої кишки, легень, лейкемії.

Література

1. Tejchman W., Korona-Glowniak I., Kwietniewski L., Żesławska E., Nitek W., Suder P., Malm A. Antibacterial properties of 5-substituted derivatives of rhodanine-3-carboxyalkyl acids. Part II. *Saudi Pharmaceutical Journal*. 2020. Vol. 28, N 4. P. 414–426.
2. Mousavi S.M., Zarei M., Hashemi S.A., Babapoor A., Amani A.M. A conceptual review of rhodanine: current applications of antiviral drugs, anticancer and antimicrobial activities. *Artificial Cells, Nanomedicine, and Biotechnology*. 2019. Vol. 47, N 1. P. 1132–1148.
3. El-Miligy M.M.M., Hazzaa A.A., El-Messmary H., Nassra R.A. El-Hawash S.A.M. New hybrid molecules combining benzothiophene or benzofuran with rhodanine as dual COX-1/2 and 5-LOX inhibitors: Synthesis, biological evaluation and docking study. *Bioorganic Chemistry*. 2017. Vol. 72. P. 102–115.
4. Kamar A.K.D., Lim Ju.Y., Liang Ch.T., Fung G.T., Avupati V.R. Rhodanine scaffold: A review of antidiabetic potential and structure–activity relationships (SAR). *Medicine in Drug Discovery*. 2022. Vol. 15. P. 100131–100160.
5. Lim Ju.Y., Kamar A.K.D., Fung G.T., Liang Ch.T., Avupati V.R. Review of anticancer potentials and structure-activity relationships (SAR) of rhodanine derivatives. *Biomedicine & Pharmacotherapy*. 2022. Vol. 145. P. 112406–112445.
6. Szczepański J., Tuszewska H., Trotsko N. Anticancer profile of rhodanines: structure-activity relationship (SAR) and molecular targets—a review. *Molecules*. 2022. Vol. 27. P. 3750–3779.
7. Khodair A.I., Awad M.K., Gesson J.-P., Elshaier Y.A. New N-ribosides and N-mannosides of rhodanine derivatives with anticancer activity on leukemia

cell line: Design, synthesis, DFT and molecular modelling studies. *Carbohydrate Research*. 2020. Vol. 487. P. 107894–108911.

8. Кобзар О.Л., Година Д.М., Синенко В.О., Ковалішин В.В., Трохименко О.П., Сливчук С.Р., Музичка О.В. Прогнозування біоактивності і синтез нових 3-заміщених 5-тіазолілметиленроданінів. *Доповіди Національної академії наук України*. 2020. № 5. С. 70–77.

9. Obernikhina N.V., Kobzar O.L., Kachaeva M.V., Kachkovsky O.D., Brovarets V.S. *In silico* and *in vitro* estimation of structure and biological affinity of 1,3-oxazoles: Fragment-to-Fragment Approach. *Current Computer-aided Drug Design*. 2022. Vol. 18, N 2. P. 330–338.

10. Neto L.R.S., Moreira J.T., Neves B.J., Maidana R.R., Guimarães R., Furnham N., Andrade C.H., Silva F.P. *In silico* strategies to support fragment-to-lead optimization in drug discovery. *Frontiers in Chemistry*. 2020. Vol. 8. P. 93–102.

11. Boyd M.R., Paull K.D. Some practical considerations and applications of the national cancer institute *in vitro* anticancer drug discovery screen. *Drug Development Research*. 1995. Vol. 34. P. 91–109.

12. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R. et al. Gaussian 09, Revision A.02; Gaussian, Inc.:Wallingford, 2016.

13. Lin Y.-S., Li G.-D., Mao S.-P., Chai J.-D. Long-range corrected hybrid density functionals with improved dispersion corrections. *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2012. Vol. 9, N 1. P. 263–272.

14. Rauk A. Orbital interaction theory. In *Orbital interaction theory of organic chemistry*. John Wiley & Sons, Inc., 2001. P. 34–71.

15. Obernikhina N., Pavlenko O., Kachkovsky A., Brovarets V. Quantum-chemical and experimental estimation of non-bonding level (Fermi level) and π -electron affinity of conjugated systems. *Polycyclic Aromatic Compounds*. 2021. Vol. 41, N 10. P. 2110–2119.

Зінченко О.В. 168
Злочевський К.В. 232
Зубенко С.О. 196
Качковський О.Д. 125
Казакова О.О. 264
Каменських Д.С. 251
Качаєва М.В. 41, 146
Кісельова Т.О. 274
Климчук Д.О. 182
Кліщенко Р.Є. 241
Кобзар О.Л. 3
Кобилінський С.М. 172
Кобріна Л.В. 182, 235
Коваленко Л.Л. 159
Ковалішин В.В. 25
Козак Н.В. 225
Козлова Г.А. 274
Коновалов С.В. 196
Копіч В.М. 65
Коптева Г.Є. 235
Коптева Ж.П. 235
Коріненко Б.В. 251
Костюк О.М. 47
Косянчук Л.Ф. 225
Котинська Л.Й. 189
Кочетова Я.В. 285
Кравець В.С. 37
Кузема П.О. 137
Купчик Л.А. 189
Кустуров В.В. 176
Кучер О.В. 14
Лагута І.В. 137
Лемешко В.М. 235
Лисенков Е.А. 159
Ліпковська Н.О. 264
Лісняк С.О. 220
Лось О.В. 8
Макаров А.С. 241
Мамуня Є.П. 172
Маринін А.І. 172
Мархайчук В.Ю. 37
Мельников К.П. 98
Мельничук О.В. 232
Мельничук П.В. 142
Метелиця Л.О. 25, 31
Миронюк І.Є. 155
Місчанчук О.В. 137
Монастирецький М.Г. 182
Москвіна В.С. 14
Музичка Л.В. 31, 79
Музичка О.В. 79
Нечаєва Л.Ю. 220, 274
Носков Ю.В. 155, 292
Оберніхіна Н.В. 125
Огурцов М.О. 292
Опейда Й.О. 86
Оранська О.І. 137
Павлюк О.В. 149
Пертко О.П. 149, 196, 232
Пилипенко А.М. 159, 235, 278
Підлужний П.О. 120
Пільо С.Г. 3, 41, 65, 110, 146
Плескун С.М. 176
Поважний В.А. 149, 232, 251
Полункін Є.В. 176
Попільніченко С.В. 65
Потіха Л.М. 8
Пуд О.А. 155, 292
Рибальченко Н.П. 172
Робота Л.П. 256
Рогальський С.П. 25, 149, 278
Рожнова Р.А. 220, 274
Романова А.М. 14
Руденко А.В. 235
Русанов Е.Б. 120
Рябов С.В. 182
Савельєв Ю.В. 256
Самойленко Т.Ф. 159, 202
Сафронов О.І. 164
Святненко Р.С. 172

ЗМІСТ

Розділ 1. Синтез і дослідження біоактивних сполук.....	3
Шульга Ю.В., Кобзар О.Л., Булденко В.М., Пільо С.Г., Вовк А.І. 4-(5-Заміщені фуран-2-іл)бензойні кислоти як інгібітори глутатіон- <i>S</i> -трансферази.....	3
Синенко В.О., Лось О.В., Потіха Л.М., Броварець В.С. Отримання функціоналізованих 1,3-тіазолів за допомогою перегрупування «halogen dance».....	8
Тімохін О.С., Романова А.М., Москвіна В.С., Кучер О.В., Бойко О.І., Броварець В.С. Хроман-4-оли із (цикло)алкільними, гетероциклічними та спіроциклічними замісниками в положенні 2: синтез та особливості ензиматичного розділення.....	14
Kostina V.G., Alexeeva I.V., Lysenko N.A., Kuziv Ia.B., Dubey I.Ya. Synthesis of 9-amino-substituted cyclic diamides of acridine-4,5-dicarboxylic acid: new heterocyclic system with potential affinity to DNA.....	20
Година Д.М., Рогальський С.П., Ковалішин В.В., Метелиця Л.О. Довголанцюгові <i>N</i> -алкілморфоліни як біорегулятори подвійної дії: дослідження протигрибкового та цитотоксичного потенціалу.....	25
Музичка Л.В., Година Д.М., Метелиця Л.О., Смолій О.Б. Синтез та <i>in vitro</i> антибактеріальна активність амонієвих солей проти плівкоутворюючих штамів <i>Escherichia coli</i> та <i>Staphylococcus aureus</i>	31
Мархайчук В.Ю., Дерев'янчук М.В., Кравець В.С. Вплив 4-гідрокси-2,2,6,6-тетраметилпіперидин- <i>N</i> -оксиду на активність замикаючих клітин <i>A.thaliana</i>	37
Северін О.О., Пільо С.Г., Качаєва М.В., Броварець В.С. Нові сульфоніламідні похідні 1,3-оксазолу та 1,3-тіазолу: перспективи відкриття противірусних агентів.....	41
Швиденко Т.І., Загорулько С.П., Костюк О.М. Синтез нових ізомерних [4-(2,5-диметилпірол-1-іл)-1 <i>H</i> -піразол-3-іл]піридинів та піримідинів.....	47
Faiziev O.O., Kolodiazhna A.O., Kolodiazhnyi O.I. Deracemization of fluorinated arylcarboxylic acids using a <i>Burkholderia cepacia</i> lipase biocatalyst under usual conditions and with microwave irradiation.....	51
Шестеренко Ю.А., Шестеренко Є.А., Декіна С.С. Біосинтез L-ДОФА за допомогою тирозинази <i>Agaricus bisporus</i>	58
Циганкова В.А., Копіч В.М., Василенко Н.М., Андрусевич Я.В., Пільо С.Г., Попільніченко С.В., Броварець В.С. Регуляторний ефект похідних тієнопіримідину на процеси росту та фотосинтезу у рослин сорго.....	65
Kolesnikov Ya., Kretynin S. Role of specific phospholipase D isoforms in spermine-induced morpho-physiological responses in optimal and stress conditions in <i>Arabidopsis thaliana</i>	73

Музичка О.В., Музичка Л.В., Смолій О.Б., Вовк А.І. Синтез та оцінка активності заміщених піразино[1',2':1,5]піроло[2,3- <i>d</i>]піримідинів як інгібіторів ацетилхолін естерази.....	79
Заїка Є.О., Броварець В.С. Синтез нових біцикло[2.1.1]сультамів.....	83
Волкова Л.К., Опейда Й.О. Вплив електронних і термохімічних характеристик насичених вуглеводнів на їх реакційну здатність в каталізованій паладієм(II) функціоналізації.....	86
Kretynin S., Kolesnikov Ya. Role of specific isoforms of diacylglycerol kinases in spermine-induced regulation of proline metabolism during salt stress in <i>Arabidopsis thaliana</i>	93
Бабій І.С., Бабій С.Б., Мельников К.П. Фенацилімін пентафторацетону – реагент для синтезу фторованих азотовмісних сполук.....	98
Kovalishyn V.V., Hodyna D.M., Brazhko O.A., Metelytsia L.A. <i>In silico</i> and <i>in vivo</i> studies of acute toxicity of quinoline derivatives as antibacterials...	104
Шевченко Н.М., Пільо С.Г., Броварець В.С. Синтез 1,2,4-оксадіазоловмісних 4-ціано-1,3-оксазолів.....	110
Шумейко О.Є., Бураков М.І. Функціоналізація мономерних та димерних поверхнево-активних речовин оксимними фрагментами.....	114
Підлужний П.О., Василишин Р.Я., Демидчук Б.А., Русанов Е.Б., Броварець В.С. Синтез 1,3-тіазол-5-сульфоніламідів.....	120
Синенко В.О., Оберніхіна Н.В., Качковський О.Д., Броварець В.С. <i>In vitro</i> антиракова оцінка та <i>in silico</i> вивчення 1,3-тіазол-2-іл- та 1,3-тіазол-5-ілвмісних роданінів.....	125
Агунович В.А., Бугера М.Я., Герус І.І. Синтез нових семичленних циклічних амінів із CF ₂ -ланкою.....	132
Фесенко Т.В., Ставинська О.М., Кузема П.О., Оранська О.І., Борисенко М.В., Аніщенко В.М., Місчанчук О.В., Лагута І.В. Синтез наночастинок оксиду церію з використанням екстракту з вичавок насіння <i>Camelina sativa</i>	137
Мельничук П.В., Шаблікін О.В. Одержання заміщених вінілдиметилфосфіноксидів та їх використання у реакції [3+2]-циклоприєднання з <i>N</i> -бензил азометиновим ілідом.....	142
Баллі Т.Д., Пільо С.Г., Качаєва М.В., Северін О.О., Броварець В.С. Синтез 5-амінокислотних похідних 4-ціано-1,3-оксазолу.....	146
Розділ 2. Нові речовини і матеріали та їх застосування.....	149
Рогальський С.П., Джу́жа О.В., Тарасюк О.П., Поважний В.А., Пертко О.П., Павлюк О.В., Євдокименко В.О. Отримання і дослідження термореактивного полімерного композиту на основі фенолформальдегідної смоли і полівінілбутиралу.....	149

Наукове видання

ІНСТИТУТ БІООРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ ТА НАФТОХІМІЇ
ім. В.П. КУХАРЯ
НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

**БІОАКТИВНІ СПОЛУКИ,
НОВІ РЕЧОВИНИ І МАТЕРІАЛИ**

Збірник наукових праць

За загальною редакцією А.І. Вовка

Технічний редактор – О.В. Шибирин

Коректор – С.В. Попільніченко

Комп'ютерна верстка – О.В. Шибирин

Дизайн обкладинки – О.Л. Кобзар

Підписано до друку 01.10.2024

Формат 60x84/16. Друк офсетний

Гарнітура TimesNewRoman. Умов. друк. арк.: 17.8

Наклад прим.: 50. Замовлення № 0110/24

Видавець: ТОВ «НВП «Інтерсервіс»

м. Київ, вул. Бориспільська, 9

Свідоцтво: серія ДК № 3534 від 24.07.2009 р.

Виготовлювач: ТОВ «НВП «Інтерсервіс»

м. Київ, вул. Бориспільська, 9

Свідоцтво: серія ДК № 3534 від 24.07.2009 р.