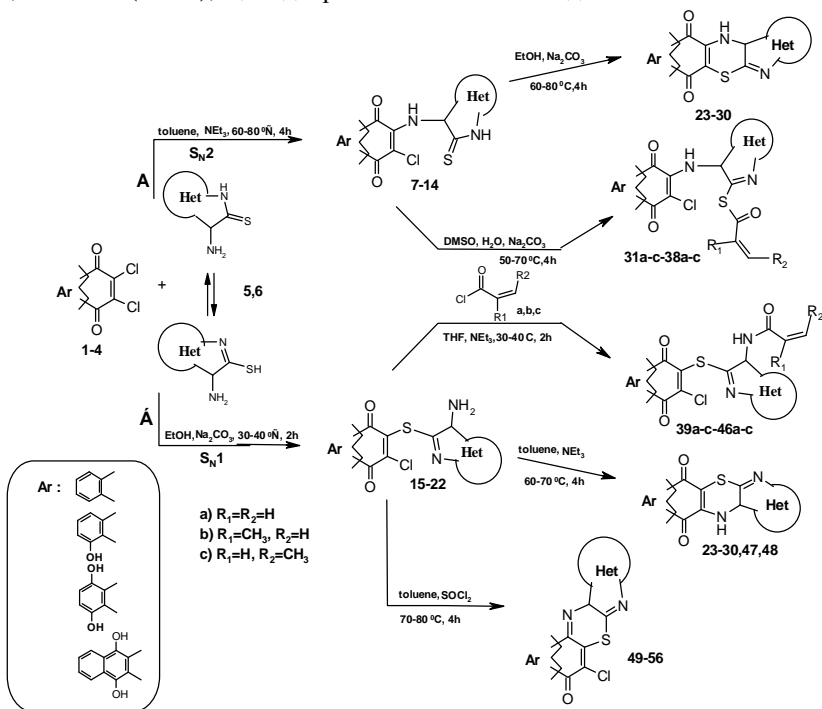


## СИНТЕЗ ТА ПЕРЕТВОРЕННЯ ПРОДУКТІВ ВЗАЄМОДІЇ ПОХІДНИХ 1,4-ХІНОНІВ З 1,4-S,N-БІНУКЛЕОФІЛАМИ

У роботі розглянуто синтез ряду нових конденсованих гетероциклічних похідних сполук 1,4-хінонів. Реалізацію цього підходу вдалось здійснити взаємодією відповідних S,N-бінуклеофілів з хінонами, підбираючи умови реакції, нам вдалося одержати, як продукти N-нуклеофільного заміщення (**7-14**) так, відповідно, S-заміщення атома хлору (**15-22**) з подальшою їх циклізацією до відповідних поліциклічних конденсованих гетероциклічних похідних 1,4-хінонів (**23-30**), що відображено на нижченаведеній схемі.



Завдяки своїм структурним особливостям та наявності активних реакційних центрів отримані раніше сполуки (**7-22**) можуть бути

модифіковані по декількох напрямках з метою підвищення їх біологічної активності. На наведеній вище схемі проілюстровано один із варіантів перетворення структур (**7-22**) введенням у молекулу залишків акрилових кислот по S,N-нуклеофільних центрах з отриманням відповідних продуктів (**31a-c**, **38a-c**).

Будова та склад синтезованих сполук (**7-56**) були підтверджені фізико-хімічними методами аналізу (ПМР-, ІЧ-, хромато-мас-спектроскопіями), даними елементного аналізу, ТШХ.

Нами було *in silico* спрогнозовано можливість прояву біологічної активності синтезованих сполук і на основі результатів молекулярного докінгу вибрано сполуки-хіти, які є цікавими для подальшого вивчення. Спостерігається можливість  $\pi$ - $\pi$  зв'язування між антрахіноновим фрагментом сполуки-хіта та фрагментами пуринових нуклеотидів, а також гідрофобні взаємодії морфолінодоксорубіцину та фрагменту ДНК імітує триазоло-фурильний боковий фрагмент досліджуваної речовини.

Візуалізація результатів докінгу (програма *VIDA*) наведена на рис. 1, 2.



Рис. 1. Сполука-хіт у області зв'язування фрагмента ДНК



Рис.2. Сполука-хіт у області зв'язування фрагмента ДНК, накладання зі стандартним лігандом

Підсумовуючи проведені докінгові дослідження, можемо зробити висновок про найвищий рівень зв'язування речовини **19** із фрагментом ДНК за допомогою інтеркаляції, що визначає її перспективність у сенсі реалізації протиракової активності. Отже, для синтезованої серії нових гетероциклічних похідних 1,4-хінонів експериментально встановлена перспективна для розвитку тематики протиракова активність *in vitro*.