

УДК 591.481.1-001:57.012.4

Д.В. Савицька¹, С.А. Михальський¹, В.В. Белошицкий², Н.В. Скрипник³, Т.Ю. Квитницькая-Рыжова¹¹ГУ «Институт геронтології імені Д. Ф. Чеботарева НАМН України»,²ГУ «Институт нейрохірургії імені А.П. Ромоданова НАМН України»,³УНЦ «Институт біології» КНУ імені Тараса Шевченка**СТРУКТУРНЫЕ И МОРФОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ РЕАКЦИИ СЕНСОМОТОРНОЙ КОРЫ КРЫС РАЗНОГО ВОЗРАСТА ПОСЛЕ ЧЕРЕПНО-МОЗГОВОЙ ТРАВМЫ И ГЕННОЙ ТЕРАПИИ**

На модели тяжелой черепно-мозговой травмы (ЧМТ) у взрослых и старых крыс линии Вистар показано существенные модификации цитоархитектоники коры головного мозга, выражающиеся в изменении нормальной структуры нервной ткани, уменьшении числа нейронов и резком увеличении нейроглии. «Выпадение нейронов» и одиночные апоптотические клетки наблюдались в основном в слоях коры, расположенных ближе к волокнам белого вещества. Генная терапия путем липосомальной трансфекции ткани головного мозга плазмидным вектором, несущим ген апоЕ3, существенно уменьшала реактивный глиоз коры и положительно влияла на количество нейронов, предотвращая их потерю у взрослых и, особенно, у старых крыс.

Ключевые слова: черепно-мозговая травма, генная терапия, кора, структурные изменения, морфометрия, возрастные особенности.

UDC: 591.481.1-001:57.012.4

D. V. Savitska¹, S. A. Mikhalsky¹, V. V. Biloshytsky², N. V. Skrypnyk³, T. Yu. Kvitnytska-Ryzhova¹¹State Institution «D. F. Chebotarev Institute of Gerontology NAMS Ukraine»,²State Institution «A. P. Romodanov Institute of Neurosurgery NAMS Ukraine»,³ESC «Institute of biology» National Taras Shevchenko University of Kyiv**STRUCTURAL AND MORPHOMETRIC INDICATORS OF SENSOMOTOR CORTEX REACTION OF RATS OF DIFFERENT AGES AFTER TRAUMATIC BRAIN INJURY AND GENE THERAPY**

Based on the model of severe traumatic brain injury (TBI) of adult and old Wistar rats has been shown substantial modifications of cortex cytoarchitectonic, that were reflected in the change of the normal structure of the nervous tissue, reducing the number of neurons and abrupt increase in neuroglia. «Loss of neurons» and rare apoptotic cells were observed more frequently in the layers of the cortex, located closer to the white fibers. Gene therapy by means of liposomal transfection brain tissue using plasmid vector carrying the gene apoE3, significantly decreased reactive gliosis of the cortex and positively affected the number of neurons, preventing their loss in adults and especially in old rats.

Keywords: brain injury, gene therapy, the cerebral cortex, structural changes, morphometry, age features.

Адреса для листування:

04114, м. Київ, вул. Вишгородська, 67
тел.: 044-430-40-68

Надійшла до редакції:

29.06.2013 р.

УДК 615.015^541.182.024(02):577.33

І. С. ЧЕКМАН, С. Б. ФРАНЦУЗОВА

Національний медичний університет ім. О. О. Богомольця
Інститут фізіології ім. О. О. Богомольця НАН України**ІСТОРИЧНІ ЕТАПИ РОЗВИТКУ ФАРМАКОЛОГІЇ: ДОСЯГНЕННЯ, ПЕРСПЕКТИВИ ДОСЛІДЖЕНЬ (ПОГЛЯД НА ПРОБЛЕМУ)**

Присвячується пам'яті всесвітньо відомого вченого-біохіміка, члена-кореспондента НАН України, професора А.М. Утевського

В статті обобщены данные литературы и результаты собственных исследований, касающиеся исторических этапов развития фармакологической науки различных направлений: фенологической (физиологической), биохимической, молекулярной, физико-химической, квантовой, а также нанофармакологии. Сделан вывод, что молекулярные механизмы первичной фармакологической реакции лекарственных средств еще окончательно не установлены и остаются предметом дальнейших интенсивных исследований ученых различных специальностей.

Наукові дослідження з розробки нових лікарських засобів, дослідження механізму їх дії та застосування у клінічній практиці є основною метою спеціалістів різного профілю — хіміків, фармакологів, (провізорів), технологів, клініцистів. Встановлення механізму лікувальної дії медикаментів — первинної фармакологічної реакції, їх впливу на рецептори, функцію органів і систем організму, а також обмін речовин є важливим аспектом лікознавства. В науковій літературі, яка стосується досліджень механізмів первинної фармакологічної реакції лікарських засобів, виділяють декілька історичних етапів: феноменологічна (фізіологічна), біохімічна, молекулярна, фізико-хімічна, квантова фармакологія, а також нанофармакологія.

Феноменологічна (фізіологічна) фармакологія, як фундаментальна дисципліна, розгорнула експериментальні дослідження на тваринах для вивчення механізму дії лікарських засобів ще на початку XIX століття. На перших етапах зародження та еволюційного розвитку фармакології, як самостійної науки, дослідники вивчали вплив препаратів на діяльність органів і систем організму. Фармакологи реєстрували здебільшого функціональні зміни під впливом лікарських засобів, тобто проводили дослідження у галузі експериментальної або феноменологічної фармакології.

Експериментальні фармакологічні лабораторії були відкриті Р. Бухгеймом університеті м. Тарту (1847), О.О. Соколовським у — Московському університеті (1865) та І.В. Забелінін у Петербурзькій медико-хірургічній академії (1869). Одним з перших у світі дослідження з експериментальної (феноменологічної) фармакології розпочав завідувач кафедри фармакології університету Святого Володимира (м. Київ) В.І. Дибковський (1836-1870).

Дослідження з феноменологічної (фізіологічної) фармакології, які досягли кульмінації у 50–80 роках XX століття, тривають і донині. Науковці різних країн світу детально вивчили і продовжують вивчати вплив лікарських засобів на діяльність органів і систем організму, також розвиток побічних реакцій [2, 4]. Однак дослідження з феноменологічної (фізіологічної) фармакології не могли відповісти на питання: чому той чи інший лікарський засіб викликає певний, характерний саме для нього лікувальний або токсичний ефекти? Це слугувало підставою для виникнення біохімічної фармакології.

Біохімічна фармакологія. У 20-их роках XX століття зароджується новий напрямок досліджень — біохімічна фармакологія. Біохімічна фармакологія вивчає вплив лікарських засобів на

обмін речовин в організмі з метою встановлення біохімічних механізмів первинної фармакологічної реакції та нормалізації порушень метаболізму, які мають місце за умов патологічних станів. Результати досліджень у галузі біохімічної фармакології дали змогу з'ясувати особливості дії лікарських засобів на обмін речовин у різних органах організму і поглибити існуючі уявлення щодо первинної фармакологічної реакції [7, 10, 11, 14]. Одним із перших у світі дослідження з біохімічної фармакології започаткував видатний український учений академік О.І. Черкес. У 1926 році Олександр Ілліч публікує у журналі *Biochem. Zeitsch.* статтю: «Про дію наркотиків на хімічний склад головного мозку». Це була одна з перших наукових праць у новому напрямку фармакології — біохімічній фармакології. Коли у 1930 р. О.І. Черкеса обрали завідувачем кафедри фармакології Харківського медичного інституту, він і його співробітники розгорнули дослідження з біохімічної фармакології серцево-судинних засобів, зокрема, серцевих глікозидів. Завершальним підсумком цих розробок стала монографія «Експериментальні дослідження з фармакології серця» [11]. Дослідження з біохімічної фармакології серцевих глікозидів продовжували учні О.І. Черкеса: В.Ф. Мельникова, М.І. Сластьон, В.І. Сила, Е.М. Айрапетян, М.А. Ангарська, Н.М. Дмитрієва, В.А. Крементуло, М.Я. Тверська, Е. Аджикулов, В.Г. Дужак, І.С. Чекман, С.Б. Французова, К.І. Рубчинська, Н.О. Горчакова, Р.Д. Самілова, І.Ф. Полякова, О.П. Вікторов.

Значний внесок у розвиток біохімічної фармакології зробили українські дослідники: А.М. Утевський, Я.Б. Максимович, Ю.І. Іванов, Р.В. Рудий, Я.І. Хаджай, С.М. Кіт, Г.Є. Батрак, С.І. Хрустальов, М.С. Харченко, а також російські вчені — М.П. Кравков, В.С. Скворцов, С.В. Анічков, В.В. Закусов, М.Д. Машковський, А.В. Вальдман, К.М. Лакін, А.С. Саратиков, В.С. Заїконнікова, П.В. Сергеев та ін. Багато зробили в цьому напрямку і зарубіжні науковці: В. Блек, М. Фохт, О. Тренделенбург, Ф. Ейлер, Р. Алквіст, Ю. Аксельрод, Б. Броді та ін.

Фундаментальні дослідження з фармакології і біохімії катехоламінів, проведені академіком О.І. Черкесом і член-кореспондентом А.М. Утевським, сприяли впровадженню у медичну практику адреналіну, норадреналіну, з'ясуванню механізму дії ефедрину, резерпину та ін.

В світі досягнень щодо вивчення функції та обміну катехоламінів та розуміння їх ролі як об'єкту впливу лікарських засобів принципово новим був напрямок роботи академіка

О.І. Черкеса і його учнів в галузі біохімічної фармакології, що торкався саме виявлення адренергічних механізмів в дії низки серцево-судинних медикаментів (інгібітори моноаміноксидази, серцеві глікозиди, α та β — адреноблокатори, резерпін та інші антиадренергічні засоби, гіпотензивні препарати різних фармакологічних груп, інгібітори біосинтезу катехоламінів та ін.).

Починаючи дослідження автори цієї статті, на той час молоді науковці, в 1964 році прийняли участь в роботі науково — методичного семінару з біогенних амінів, що його проводив на своїй кафедрі професор А.М. Утевський. Особистість вченого, форма і зміст його чудових лекцій, рекомендації стосовно впровадження методів визначення катехоламінів в біологічних середовищах (органах та тканинах) не тільки вразили нас — молодих фармакологів, але й значно посилили інтерес до актуальної на той час проблеми.

В наступні роки був виконаний великий обсяг досліджень з цих питань, який дозволив сформулювати оригінальні і пріоритетні на той час висновки щодо адренергічних механізмів дії лікарських засобів. Отримані результати знайшли втілення в наступних дисертаційних роботах: І.С. Чекмана (кандидатська дисертація «Экспериментальные исследования фармакологии производных пропилламина» (1966); (докторська дисертація «Экспериментальные исследования механизмов действия антиадренергических средств» (1973); С.Б. Французові (кандидатська дисертація «Влияние гипотензивных средств на некоторые стороны обмена катехоламинов» (1968), (докторська дисертація «Адренергические механизмы в действии сердечно-сосудистых средств» (1978), а також у статтях, монографіях.

Саме величезний комплекс біохімічних досліджень дозволив О.І. Черкесу сформулювати оригінальне уявлення про трофічну дію серцевих глікозидів на міокард і їх властивість відновлювати метаболізм міокарда, який страждає за умов патології [11].

Молекулярна фармакологія. На підмурівках біохімічної фармакології та

завдяки досягненням теоретичної біофізики та біохімії почала розвиватися молекулярна фармакологія, що досліджує вплив лікарських засобів на функцію рецепторів, синапсів, іонних каналів, клітинних і субклітинних мембран, структурно-функціональні зміни в молекулах білків, ліпідів, вуглеводів. Завдяки досягненням з молекулярної фармакології синтезовані і впроваджені у медичну практику агоністи та

антагоністи рецепторів, а також медикаменти на основі хімічної подібності до ендогенних фізіологічно активних сполук організму [1, 12, 13].

Фізико-хімічна фармакологія вивчає особливості взаємодії медикаментів з біомолекулами та компонентами біомембран [3]. Дослідження з фізико-хімічної фармакології проводяться в Одеському національному університеті ім. І. Мечнікова (академік АМН України М.Я. Головенко), Одеському національному медичному університеті (член-кореспондент АМН В.Й. Кресюн), Інституті фармакології і токсикології (чл.кор. НАМН України Т.А. Бухтіярова), Національному фармацевтичному університеті (член-кореспондент НАН України В.П. Черних), Луганському медичному університеті (професор В.Д. Лук'янчук), Дніпропетровській медичній академії (професор В.Й. Мамчур) та ін.

Дослідження проведені в лабораторії кафедри фармакології та клінічної фармакології Національного медичного університету ім. О.О. Богомольця виявили, що лікарські засоби утворюють комплекси різної стійкості з основними мембранозв'язуючими біолігандами: амінокислотами, ліпідами, вуглеводами, аденіновими нуклеотидами, нікотинамідними коферментами, біометалами [7].

Нанофармакологія вивчає фізико-хімічні, фармакодинамічні, фармакокінетичні властивості розроблених на основі нанотехнологій нанопрепаратів, показання, протипоказання до їх застосування, можливі побічні ефекти. Нанофармація (Nanopharmasy) досліджує технології розробки лікарських форм нанопрепаратів для ефективного застосування у медичній практиці [5, 8, 15, 16]. Більшість органел клітин, біологічних речовин, лікарських засобів, фізіологічно активних речовин організму людини і рослин мають нанорозміри, що зумовлює їх високу біохімічну та фармакологічну активність, властивість регулювати обмін речовин в організмі людини. Дослідження з нанофармації інтенсивно проводяться в інститутах НАН і НАМН, університетах України.

За ініціативи академіка Б.Є. Патона і академіка В.Ф. Москаленка створена спільна лабораторія між Інститутом електрозварювання ім. С.О. Патона та Національним медичним університетом ім. О.О. Богомольця «Електронно-променевої нанотехнології неорганічних матеріалів для медицини», у якій розроблено технологію отримання наночастинок заліза, міді, срібла та інших металів, проводиться вивчення їх фармакологічної активності [6].

За понад двадцятирічний період розвитку **квантової фармакології** основні положення цьо-

го напрямку можна визначити в таких аспектах: дослідження просторової будови та електронної структури молекули лікарських засобів; встановлення зв'язку між хімічною структурою та фармакологічною активністю медикаментів (QSAR); роль розчинника в механізмі дії препаратів; визначення фармакофорів лікарських засобів; розробка de novo дизайну засобів для лікування різних захворювань; прогнозування фармакологічної активності лікарських засобів, білок-лігандні взаємодії при реакції між фізіологічно активними речовинами препаратів та біомолекулами, дослідження первинних механізмів дії лікарських засобів [9, 17, 18].

На кафедрі фармакології та клінічної фармакології Національного медичного університету ім. О.О. Богомольця проведені дослідження по вивченню квантово-фармакологічних властивостей препаратів різних хімічних груп та механізму їх дії: серцево-судинних (каптоприл, лізиноприл, уфібрат, дигоксин), медіаторних (адреналін, атенолол, ацетилхолін, карведилол, мезатон, метопролол, пропранолол), метаболічних (ацетилцистеїн, кверцетин, нікотинамід, таурин, тіотриазолін, яктон) препаратів, похідних ксантину (кофеїн, пентоксифілін) [9].

Заключення. Історичні етапи розвитку фармакології свідчать, що дана наука пройшла тривалий період свого розвитку. Створені нові ефективні препарати для лікування різних захворювань, встановлені механізми їх лікувальної дії. Разом з тим молекулярні механізми первинної фармакологічної реакції лікарських засобів остаточно не встановлені, і становлять предмет подальших інтенсивних досліджень науковців різних спеціальностей.

ЛІТЕРАТУРА

1. Авакян О.М. Фармакологическая регуляция функции адренорецепторов. — М.: Медицина, 1988. — 256 с.
2. Аничков С.В. Избирательное действие медиаторных средств. — М.: Медицина, 1974. — 295 с.
3. Головенко М.Я. Фізико-хімічна фармакологія: Монографія. — Одеса: Астропринт, 2004. — 720 с.
4. Закусов В.В. Фармакология центральных синапсов. — М.: Медицина, 1973. — 271 с.
5. Борисевич В.Б., Каплунович В.Г., Косінов М.В., Борисович Б.В. і співав. Наноматеріали в біології. Основи нановетеринарії. — К.: ВД «Авіцена», 2010. — 416 с.
6. Патон Б.Є., Москаленко В. Ф., Чекман І. С., Мовчан Б. О. Нанофармація і нанотехно-

- логії: технічний, медичний та соціальний аспекти // Вісн. НАН України. — 2009. — №6. — С. 18–26.
7. Чекман І.С. Биохимическая фармакодинамика. — К.: Здоровья, 1991. — 200 с.
 8. Чекман І.С. Нанофармакологія. — Київ: Видавництво ПВП «Задруга». — 2011. — 423 с.
 9. Чекман І.С. Квантова фармакологія. — Київ: Науково-виробниче підприємство «Видавництво «Наукова думка» НАН України». — 2012. — 181 с.
 10. Чекман І.С., Горчакова Н.А., Французова С.Б., Нагорна Е.А. Метаболитные и метаболитоторпные препараты в системе кардио- и органопротекции. — Киев: 2009. — 155 с.
 11. Черкес А.И. Фармакодинамика сердечных гликозидов в биохимическом аспекте. В кн. «Достижения современной фармакологии». Л. Медицина. — 1976. — С. 49–58.
 12. Французова С.Б. Действие сердечных гликозидов и процесс адренергической медиации // Фармакология и токсикология. — 1977. — №6. С. 733–745.
 13. Черкес А.И., Французова С.Б. Особенно-сти действия сердечных гликозидов на некоторые показатели медиаторного обмена миокарда в условиях экспериментальной патологии // Бюллетень эксп. биол и мед. — 1972. — №12. — С. 52–54.
 14. Французова С.Б. Ингибиторы биосинтеза катехоламинов // Фармакология и токсикология. — 1973. — №5. — С. 624–628.
 15. Caruthers S.D., Wickline S.A., Lanza G.M. Nanotechnological application in medicine // Curr. Opin. Biotechnol. — 2007. — Vol. 18, №1. — P. 26–30.
 16. Medina C., Santos-Martinez M.J., Radomski A. et al. Nanoparticles: pharmacological and toxicological significance // Br. J. Pharmacol. — 2007. — Vol. 150. — P. 552–558.
 17. Popelier P.L., Smith P.J. QSAR models based on quantum topological molecular similarity // Eur. J. Med. Chem. — 2006. — Vol. 41, № 5. — P. 862–873.
 18. Yong D.C. Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real-world problems. — New-York: Wiley J.& Sons, Inc., 2001. — 370 p.

UDK.615.015`54.182.024(02):577.33

І. С. Чекман, С. Б. Французова

Національний медичний університет ім. О.О. Богомольця

Інститут фізіології ім. О.О. Богомольця НАН України

ІСТОРИЧНІ ЕТАПИ РОЗВИТКУ ФАРМАКОЛОГІЇ: ДОСЯГНЕННЯ, ПЕРСПЕКТИВИ ДОСЛІДЖЕНЬ (ПОГЛЯД НА ПРОБЛЕМУ)

В статті узагальнені дані літератури та результати власних досліджень, що торкаються історичних етапів розвитку фармакологічної науки різних напрямків: феноменологічної (фізіологічної), біохімічної, молекулярної, фізико-хімічної, квантової, а також нанофармакології. Звернуто увагу, що молекулярні механізми первинної фармакологічної реакції лікарських засобів остаточно не встановлені і залишаються предметом інтенсивних досліджень науковців різних спеціальностей.

Исторические этапы развития фармакологии: достижения, перспективы исследований (взгляд на проблему) И.С. Чекман, С.Б. Французова Национальный медицинский университет им. А.А. Богомольца Институт физиологии им. А.А. Богомольца НАН Украины

UDC.615.015`54.182.024(02):577.33

I. S. Chekman, S. B. Frantsuzova

A. A. Bogomoletz National medical university

A. A. Bogomoletz Institute of physiology, National Academy of Sciences of Ukraine

HISTORICAL PERIODS OF PHARMACOLOGY DEVELOPMENT: ACHIEVEMENTS, PERSPECTIVES OF INVESTIGATIONS (OUTLOOK ON THE PROBLEM)

The paper generalized the data of literature and the results of own investigations concerning historical periods of pharmacological science development: phenomenological (physiological), biochemical, molecular, physic-chemical, quantum pharmacology, and also nanopharmacology. The attention was drawn to the fact that molecular mechanisms of primary pharmacological drug reactions are not fixed yet and are the subject of intensive investigations of scientists of different specialties.

Адреса для листування:

04114, м. Київ, вул. Ежена Пот'є, 14

Надійшла до редакції:

25.06.2013 р.

UDK 615.31:547.857.4`572.3/6`211.024:615-222

О. С. Шкода, М. В. Дячков, К. В. Александрова, І. Ф. Бєленгєв

Запорізький державний медичний університет

ПОШУК МЕМБРАНОСТАБІЛІЗУЮЧИХ БАР СЕРЕД БЕНЗІЛІДЕНГІДРАЗИДІВ 3-БЕНЗИЛКСАНТИНІЛ-8-МЕТИЛТІОАЦЕТАТНОЇ КИСЛОТИ.

В статті представлені результати досліджень антиоксидантної активності бензіліденгідрозидів 3-бензилксантиніл-8-метилтіоацетатної кислоти з використанням in vitro методу шляхом неферментативного ініціювання вільнорадикального ліпоперекиснення, визначені певні закономірності «структура — біологічна дія» та встановлений ймовірний механізм антиоксидантної дії.

Ключові слова: похідні 3-бензилксантину, АОА, ПОЛ.

ВСТУП

Сучасна медицина розглядає біологічну мембрану не тільки як оболонку, що огорожує клітину від навколишнього середовища, але і як один з найактивніших учасників метаболічного процесу [9]. Біологічна мембрана забезпечує транспорт речовин, виконує каталітичну та регуляторну функції, приймає безпосередню участь в енергопродукції [2]. Згідно з уявленнями інтегративної медицини біологічна мембрана забезпечує біологічну цілісність організму [8].

Порушення структури і як наслідок дисбаланс в мембранних функціях викликають патологічні зміни в тканинах і органах і призводять до відповідних органічних патологій. Одними з найбільш деструктивних факторів, що впливають на біомембрані є активні метаболіти кисню (АМК). Безпосередньо шкідлива дія АМК впливає на найважливіші компоненти біомембран — ліпіди і призводить до перекисного окислення ліпідів (ПОЛ) [11].

Таким чином, органопротекція, реалізована через мембраностабілізуючу дію антиоксидантних лікарських препаратів, що пригнічують ПОЛ, є однією з актуальних проблем медицини.

Враховуючі те, що антиоксидантна дія 3-метилксантинів достатньо висвітлена в літературі [4;5;6], метою нашого дослідження став пошук антиоксидантів в ряді отриманих нами раніше нових бензіліденгідрозидів 3-бензилксантиніл-8-метилтіоацетатної кислоти [7].

МАТЕРІАЛИ Й МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Антиоксидантну активність (АОА) визначали з використанням *in vitro*-методу шляхом не-

ферментативного ініціювання вільнорадикального ліпоперекиснення [1, 10].

В якості субстрату використовували суспензію яєчних ліпопротеїнів. Робоча кількість ліпопротеїнів, приготованих із розрахунку: ліпопротеїни: 0,15 М КСІ=1:1, розводять в 10 раз 0,04 М фосфатним буфером до рН=7,4. До 4 мл суспензії додавали 1 мл розчину речовини, що досліджується (в концентраціях 10⁻³, 10⁻⁵ та 10⁻⁷ моль/л) в об'ємі 0,5 мл та 1,0 мл 0,025 М розчину FeSO₄·7H₂O (розчин готують *ex tempore*; ферум (II) сульфат повинен бути свіжокристалізованим зі спирту). Суміш інкубували 30 хв при температурі 37°C. Реакцію зупиняли розчином 0,5 мл 20 % трихлороцтової кислоти (ТХО), що містить 250 мг/100 мл трилону Б для зв'язування іонів феруму (II) та зупинки ВРО. Після центрифугування при 2000 об/хв протягом 15 хв відбирали надосадкову рідину, вносили у пробірку з 1 мл 0,8 % тіобарбітурової кислоти та розміщували на 30 хв на киплячій водяній бані. Після охолодження забарвлений комплекс виділяли додаванням до проби 4 мл бутанолу-1, струшували та центрифугували 15 хв при 2000 об/хв. Ретельно відбирали верхній шар дозатором та спектрофотометрично при λ = 532 нм проти бутанолу-1 визначали оптичну щільність. В якості етанолу порівняння використовували дибунол. Результати дослідження АОА наведені в таблиці 1.

Розрахунок квантово-механічних енергетичних дескрипторів граничних молекулярних орбіталей: (E_{ВМО}) — енергія вищої зайнятої молекулярної орбіталі та E_{НМО} — енергія нищої вакантної молекулярної орбіталі для синтезованих сполук був проведений в програмному комплексі WinMopac (ver 7.2, дескриптори —