

Міністерство охорони здоров'я України
Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

КРИЩИШИН-ДИЛЕВИЧ АННА ПЕТРІВНА

УДК 615.283.+615.277.3):547.789.1].012.1

ДОДАТКИ до ДИСЕРТАЦІЇ

4-ТІАЗОЛІДИНОНИ ТА СПОРІДЕНІ ГЕТЕРОЦИКЛИ В ДИЗАЙНІ
ПРОТИПАРАЗИТАРНИХ ТА ПРОТИПУХЛИННИХ АГЕНТІВ ЯК
ПОЛІФАРМАКОЛОГІЧНИХ ЛІКОПОДІБНИХ МОЛЕКУЛ

15.00.02 – фармацевтична хімія та фармакогнозія

226 – фармація, промислова фармація

22 – охорона здоров'я

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фармацевтичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів та текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

А. П. Крищишин-Дилевич

Науковий консультант Лесик Роман Богданович,
доктор фармацевтичних наук, професор

Львів - 2021

**Показники напівмаксимальних інгібуючих концентрацій обчислених в експериментах на *Trypanosoma brucei*
brucei (Tbb) (IC₅₀) та панелі ліній ракових клітин (GI₅₀, мкМ), включені до кореляційної матриці**

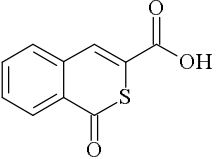
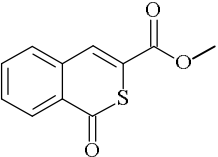
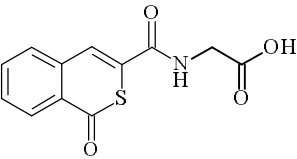
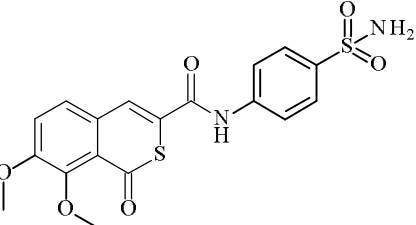
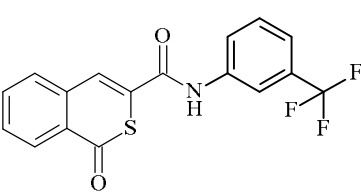
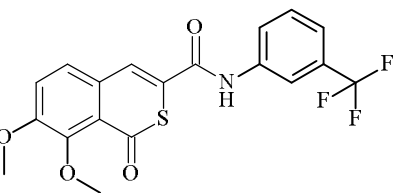
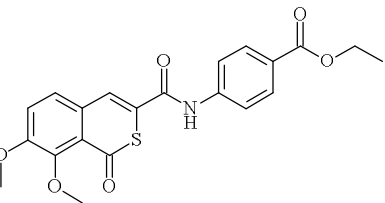
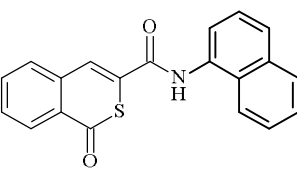
Сп-ка	Tbb (IC ₅₀ , мкМ)	Показники інгібування росту клітин ліній різних видів раку (GI ₅₀ , мкМ)																	
		Лінії лейкемії						Лінії недрібноклітинного раку легень									Лінії раку прямої кишки		
		CCRF-CEM	HL-60(TB)	K-562	MOLT-4	RPMI-8226	SR	A549/ATCC	EKVX	HOP-62	HOP-92	NCI-H226	NCI-H23	H322M	H460	H522	COLO205	HCC-2998	HCT-116
III.1	1,08	0,23	0,58	0,45	0,38	1,06	12,5	1,48	2,15	1,76	1,95	1,63	1,28	2,46	0,38	2,43	3,68	3,88	0,39
III.2	2,39	4,36	50	5,4	3,24	2,63	12,5	5,06	25,6	10,4	21,2	32,2	9,35	4,1	5,75	9,38	6,46	9,37	4,76
III.3	6,74	2,39	3,24	5,97	2,69	3,25	4,73	7,25	0,76	5,33	9,14	16	нТ	13,4	2,79	10,2	6,7	10,9	4,11
III.4	7	1,97	6,97	3,19	1,69	1,7	2,57	2,36	2,73	2,91	0,76	10,5	2,15	2,6	1,62	нТ	3,17	2,21	1,56
III.5	3,9	2,03	1,4	2,14	1,63	2,51	1,19	9,83	5,03	8,55	3,96	2,83	4,97	10	2,27	4,1	16,3	2,02	3,95
III.6	6,21	0,98	1,21	нТ	1,34	0,89	нТ	50	50	50	50	50	22,8	50	50	2,01	1,97	50	2,19
III.7	0,76	0,75	2,64	3,35	2,52	0,7	1,69	100	62,6	10,1	3,69	49,1	8,08	72,8	100	2,59	100	100	2
III.8	8,97	1,97	6,97	3,19	1,69	1,7	2,57	2,36	2,73	2,91	0,76	10,5	2,15	2,6	1,62	нТ	3,17	2,21	1,56
III.9	29,32	1,62	100	нТ	5,94	5,69	12,1	100	100	100	2,13	100	100	100	79,6	100	100	100	100
III.10	3,72	38,4	22,2	45,2	6,87	2,55	нТ	38,8	67,2	89,2	40,1	28,6	75,8	50,2	49,4	83,1	42,9	31,8	31,3
III.11	3,9	93	55,5	31,4	34,4	32,4	4,4	100	100	100	10,1	100	100	100	100	100	100	нТ	16,5

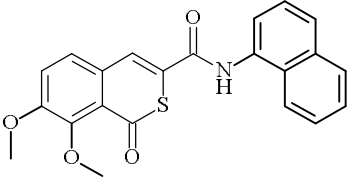
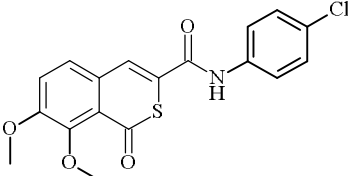
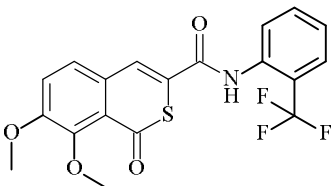
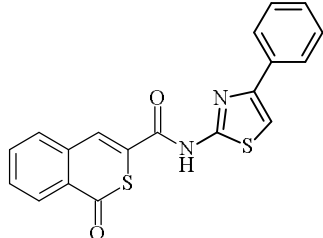
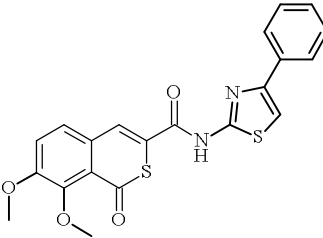
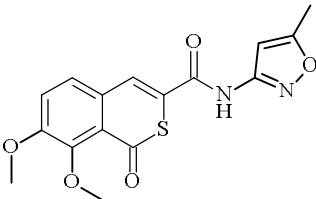
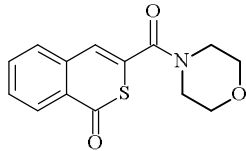
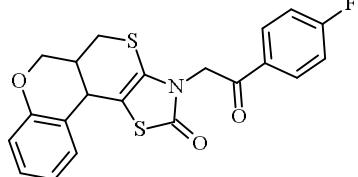
Сп-ка	Показники інгібування росту клітин ліній різних видів раку (GI ₅₀ , мкМ)																
	Лінії раку прямої кишки				Лінії раку ЦНС						Лінії раку яйників						
	НСТ-15	НТ29	КМ12	SW-620	SF-268	SF-295	SF-539	SNB-19	SNB-75	U251	OVCAR-3	OVCAR-4	OVCAR-5	OVCAR-8	NCI/ADR-RES	SK-OV-3	IGROV1
III.1	0,42	1,93	1,08	0,86	0,94	0,28	1,15	2,68	2,41	0,53	2,08	0,37	2,13	1,01	0,92	4,93	НТ
III.2	5,5	1,7	4,21	7	5,86	12,1	5,34	9,18	8,72	6,36	8,67	5,93	9,48	6,48	9,28	10	11,8
III.3	7	7,68	5,39	4,84	7,57	1,9	6,76	12,8	19,8	6,77	11,7	6,52	13,7	9,81	9,35	16	0,29
III.4	1,24	0,43	1,82	2,04	1,88	2,36	2,06	1,79	1,75	1,52	1,42	2,64	2,7	2,83	9,06	3,31	1,57
III.5	4,63	13,1	1,71	2,25	4,97	4,21	2,39	5,06	4,58	2,69	2,51	3,35	13,7	4,53	24,7	11,6	4,23
III.6	1,45	1,83	3,2	1,47	3,61	50	50	50	1,4	1,54	1,37	23,6	50	2,46	50	50	НТ
III.7	3,4	3,74	2,98	2,19	8,9	14,4	3,32	12,9	3,05	3,57	2,05	2,28	72,8	4,27	14,4	20,3	4,61
III.8	1,24	0,43	1,82	2,04	1,88	2,36	2,06	1,79	1,75	1,52	1,42	2,64	2,7	2,83	9,06	3,31	1,57
III.9	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100
III.10	31,7	51,3	74,9	60,6	100	81,9	НТ	83,2	НТ	35	72,5	НТ	100	54,3	50,3	НТ	100
III.11	100	61,5	100	100	100	100	100	100	85,2	100	100	46,9	23,3	100	62,5	100	100

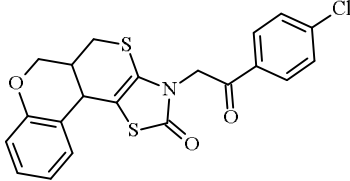
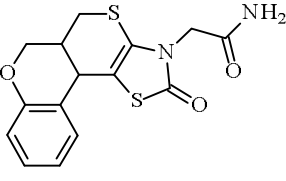
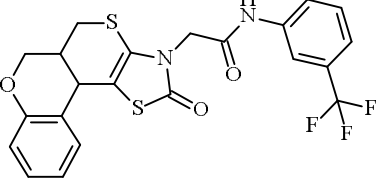
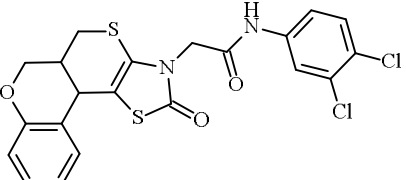
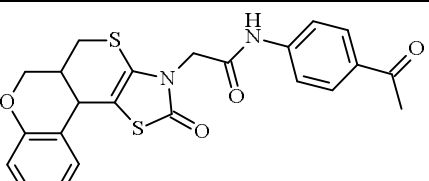
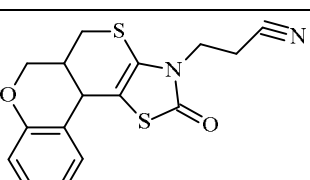
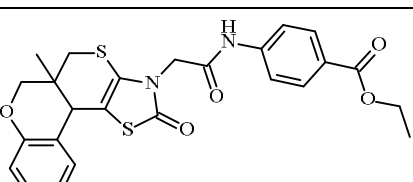
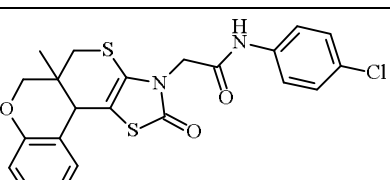
Сп-ка	Показники інгібування росту клітин ліній різних видів раку (GI ₅₀ , мкМ)																	
	Лінії меланоми								Рак нирок								Рак прост.	
	LOX IMVI	MALME-3M	MDA-MB-435	SK-MEL-2	SK-MEL-28	SK-MEL-5	UACC-257	UACC-62	786-0	A498	ACHN	CAKI-1	RXF393	SN12C	TK-10	UO-31	DU-145	PC-3
III.1	0,48	3,36	1,6	1,91	0,71	1,34	3,85	1,33	1,58	5,72	1,06	0,65	2,64	2,35	5,2	0,9	0,89	нт
III.2	7,01	9,97	22,2	9,95	13	7,59	нт	15,7	11	8,22	6,2	12,1	нт	6,71	11,9	7,09	8,21	52,4
III.3	7,48	13,2	9,87	2,5	13,3	3,81	14,9	12,9	7,55	10,7	12,3	8,32	10,6	12,2	20,7	5,66	5,51	5,03
III.4	1,56	2	1,81	14,4	2,71	1,91	3,85	11	7,18	18,2	1,18	1,03	2,84	1,58	1,79	1,92	1,54	3,34
III.5	1,67	2,49	2,96	3,1	4,03	1,3	5,43	1,79	13,6	13	2,72	9,64	2,6	2,89	6,14	3,82	6,44	3,66
III.6	0,89	13,4	4,71	17,7	10,5	50	50	37,6	50	50	27,6	16,7	нт	17,3	50	1,53	2,9	2,04
III.7	2,7	30,1	100	8,15	100	100	100	11,1	2,82	22,5	12,5	5,68	2,25	11,7	4,96	7,77	61,4	2,26
III.8	1,56	2	1,81	14,4	2,71	1,91	53	11	7,18	18,2	1,18	1,03	2,84	1,58	1,79	1,92	1,54	3,34
III.9	100	100	100	100	100	53,9	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	0,89	7,43
III.10	21,7	нт	87,4	100	85,3	32,8	38	38,5	32,7	нт	36,7	100	42	29,9	58,3	100	нт	27,7
III.11	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	100	нт	19,6

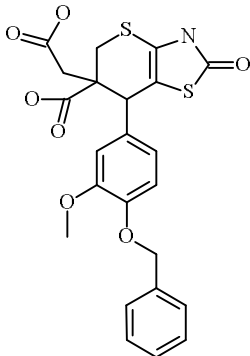
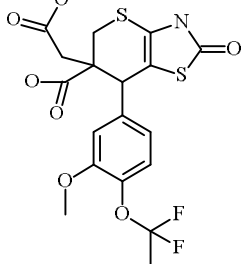
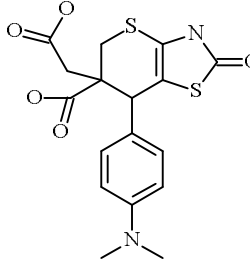
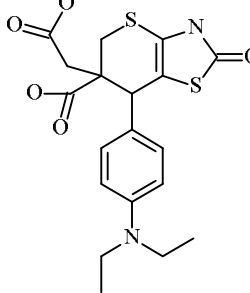
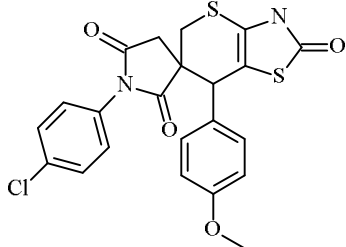
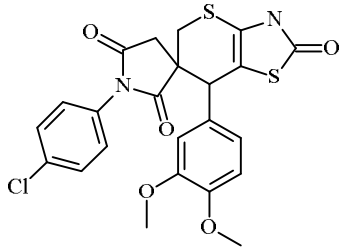
Продовження дод. А.1

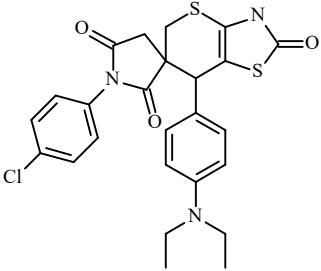
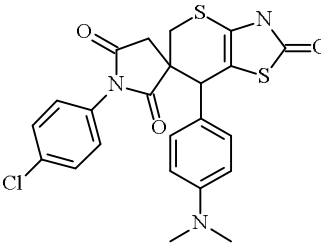
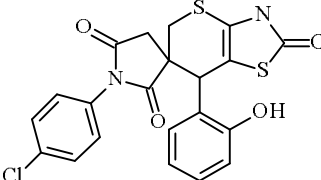
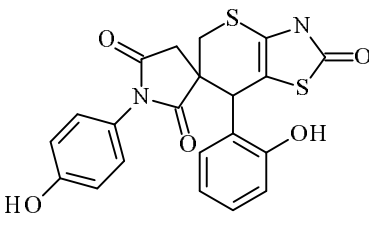
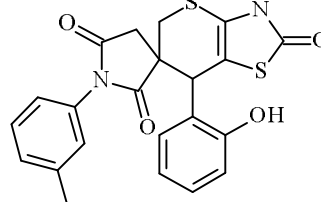
Сп-ка	Показники інгібування росту клітин ліній різних видів раку (GI ₅₀ , мкМ)				
	Лінії раку молочної залози				
	MCF7	MDA-MB-31/ATCC	HS 578T	BT-549	T-47D
III.1	0,56	3,6	6,56	2,42	1,04
III.2	2,51	7,24	7,04	8,51	6,82
III.3	4,9	15,6	13,4	10,4	8,15
III.4	1,93	1,45	1,39	13,9	1,78
III.5	2,07	2,25	2,65	3,06	1,99
III.6	1,42	16,5	4,25	9,6	0,74
III.7	2,61	14,6	8,46	100	2,32
III.8	1,93	1,45	1,39	13,9	1,78
III.9	100	100	100	100	100
III.10	51,8	24,3	66,4	64,5	49
III.11	100	20,6	100	100	100

№ п/п	Структура	Інгібування росту <i>Tb brucei</i> , % (10 мг/мл)	Посилання
III.12		16,78	[133]
III.13		35,82	[133]
III.14		10,8	[133]
III.15		59,75	[133]
III.16		5,78	[133]
III.17		-9,98	[133]
III.18		-0,53	[133]
III.19		60,78	[133]

III.20		20,79	[133]
III.21		5,77	[133]
III.22		6,86	[133]
III.23		44,18	[133]
III.24		28,59	[133]
III.25		12,16	[133]
III.26		8,13	[133]
III.27		97,45	[158]

III.28		98,49	[158]
III.29		39,76	[158]
III.30		98,65	[158]
III.31		100,13	[158]
III.32		96,17	[158]
III.33		32,03	[158]
III.34		97,51	[158]
III.35		97,44	[158]

III.36		5,0	[207]
III.37		5,0	[207]
III.38		5,0	[207]
III.39		5,6	[207]
III.40		13	[207]
III.41		93,6	[207]

III.42		98,2	[207]
III.43		98,2	[207]
III.44		11,5	[207]
III.45		18,5	[207]
III.46		24,5	[207]

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *ASNN*)

№ п/п	Дескриптори											
	ALogPS_logP	ALogPS_logS	SdssC	SaaCH	SaaS	SsCH3	SsH	SaaaC	SssO	SaasC	SaadC	SdO
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
III.13	2.02	-3.07	-0.47	8.85	0.909	1.3	-3.25	1.4	4.57	0.334	-0.117	22.9
III.14	1.09	-3.26	-1.68	8.52	0.806	0.0	-3.22	1.22	0.0	0.208	-0.214	33.7
III.15	2.5	-4.3	-0.498	10.3	0.771	2.91	-4.77	0.872	10.5	1.23	-0.344	47.7
III.17	3.99	-5.16	-0.682	8.94	0.667	2.84	-8.65	0.72	10.4	-0.214	-0.428	25.0
III.18	3.41	-5.19	-0.852	11.3	0.82	4.68	-8.82	0.946	15.5	1.93	-0.305	37.0
III.21	3.67	-5.23	-0.36	11.8	0.857	2.98	-4.98	1.01	10.5	2.32	-0.269	25.0
III.22	3.95	-5.1	-0.81	9.21	0.612	2.81	-8.62	0.648	10.4	-0.789	-0.47	25.1
III.23	4.25	-5.1	-0.304	20.8	1.78	0.0	-0.922	1.4	0.0	2.8	-0.114	24.7
III.24	3.98	-5.36	-0.363	16.8	1.66	3.0	-3.9	1.02	10.6	3.47	-0.266	25.4
III.25	2.31	-3.53	-0.409	6.7	0.838	4.75	-4.93	0.994	10.5	2.16	-0.279	24.8
III.26	1.43	-2.82	-0.073	9.16	1.02	0.0	-8.23	1.49	5.23	0.505	-0.0605	24.3
III.27	3.58	-4.36	-0.196	13.4	1.22	0.0	-10.9	0.0	5.9	3.9	-0.127	25.4
III.29	1.48	-3.29	-0.488	7.98	1.23	0.0	-5.63	0.0	5.84	3.96	-0.11	23.5
III.30	4.39	-5.13	-0.554	12.2	1.12	0.0	-13.1	0.0	5.87	2.69	-0.258	25.4
III.31	4.67	-5.0	-0.286	12.9	1.23	0.0	-9.19	0.0	5.92	5.22	-0.124	25.4
III.32	3.44	-4.33	-0.298	14.7	1.23	1.5	-10.8	0.0	5.92	5.09	-0.121	36.9
III.33	2.82	-3.21	0.0	8.12	1.34	0.0	-8.84	0.0	5.87	4.34	0.0531	12.3
III.34	4.26	-4.72	-0.705	14.5	1.22	3.95	-11.4	0.0	11.0	4.79	-0.14	37.6
III.35	4.73	-4.85	-0.235	15.0	1.25	2.21	-7.44	0.0	6.02	5.19	-0.105	25.5

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *ASNN*)

№ п/п	Дескриптори						
	SssCH2	SssNH	SsF	SsCl	SaaN	SssS	SsssCH
	13	14	15	16	17	18	19
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	-0.466	2.22	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	0.0	2.62	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	0.0	2.39	38.4	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	0.287	2.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	0.0	2.75	0.0	5.83	0.0	0.0	0.0
III.22	0.0	2.23	39.3	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	0.0	2.8	0.0	0.0	4.47	0.0	0.0
III.24	0.0	2.8	0.0	0.0	4.48	0.0	0.0
III.25	0.0	2.63	0.0	0.0	3.82	0.0	0.0
III.26	2.31	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.27	1.44	0.0	13.1	0.0	0.0	1.62	0.438
III.29	1.49	0.0	0.0	0.0	0.0	1.62	0.528
III.30	1.05	2.48	38.8	0.0	0.0	1.52	0.259
III.31	1.43	2.79	0.0	11.9	0.0	1.62	0.442
III.32	1.44	2.82	0.0	0.0	0.0	1.63	0.44
III.33	2.52	0.0	0.0	0.0	0.0	1.73	0.664
III.34	1.62	2.82	0.0	0.0	0.0	1.62	0.0612
III.35	1.43	2.84	0.0	5.9	0.0	1.64	0.0944

Продовж. дод. А.3

Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук №1 (модель *ASNN*)

№ п/п	Дескриптори											
	ALogPS_logP	ALogPS_logS	SdssC	SaaCH	SaaS	SsCH3	SsH	SaaaC	SssO	SaasC	SaadC	SdO
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
III.12	1.76	-2.54	-1.06	8.48	0.76	0.0	1.22	1.25	0.0	0.0775	-0.208	22.1
III.16	4.08	-5.01	-0.623	12.7	0.754	0.0	-5.41	1.11	0.0	-0.703	-0.276	24.3
III.19	4.39	-5.41	-0.282	22.4	0.964	0.0	-1.22	4.26	0.0	1.08	-0.107	24.8
III.20	4.15	-5.78	-0.341	18.4	0.877	3.0	-4.23	3.82	10.6	1.81	-0.259	25.5
III.28	4.12	-4.75	-0.0885	14.8	1.26	0.0	-9.18	0.0	5.92	5.16	-0.0792	25.5

Продовж. дод. А.3

Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук №1 (модель *ASNN*)

№ п/п	Дескриптори						
	SssCH2	SssNH	SsF	SsCl	SaaN	SssS	SsssCH
	13	14	15	16	17	18	19
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	0.0	2.4	38.1	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	0.0	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	0.0	2.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.28	1.58	0.0	0.0	5.91	0.0	1.66	0.497

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори										
	ALogPS_logP	ALogPS_logS	Se1C3O2ds	Se1C3C3da	Se1C1H1s	SaaCH	SaaS	SsCH3	SsH	SaaaC	SeaC3 C3aa
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
III.13	2.02	-3.07	3.46	0.621	-0.409	8.85	0.909	1.3	-3.25	1.4	1.28
III.14	1.09	-3.26	0.0	0.64	0.0	8.52	0.806	0.0	-3.22	1.22	1.24
III.15	2.5	-4.3	0.0	0.0	-1.43	10.3	0.771	2.91	-4.77	0.872	3.06
III.17	3.99	-5.16	0.0	0.0	-1.52	8.94	0.667	2.84	-8.65	0.72	2.95
III.18	3.41	-5.19	3.99	1.53	-0.818	11.3	0.82	4.68	-8.82	0.946	3.14
III.21	3.67	-5.23	0.0	0.0	-1.25	11.8	0.857	2.98	-4.98	1.01	3.14
III.22	3.95	-5.1	0.0	0.0	-1.57	9.21	0.612	2.81	-8.62	0.648	3.36
III.23	4.25	-5.1	0.0	0.701	0.0	20.8	1.78	0.0	-0.922	1.4	1.28
III.24	3.98	-5.36	0.0	0.0	-1.35	16.8	1.66	3.0	-3.9	1.02	3.12
III.25	2.31	-3.53	0.0	0.0	-1.32	6.7	0.838	4.75	-4.93	0.994	3.08
III.26	1.43	-2.82	0.0	1.12	0.0	9.16	1.02	0.0	-8.23	1.49	1.41
III.27	3.58	-4.36	0.0	0.0	0.0	13.4	1.22	0.0	-10.9	0.0	3.54
III.29	1.48	-3.29	0.0	0.0	0.0	7.98	1.23	0.0	-5.63	0.0	3.48
III.30	4.39	-5.13	0.0	0.0	0.0	12.2	1.12	0.0	-13.1	0.0	3.44
III.31	4.67	-5.0	0.0	0.0	0.0	12.9	1.23	0.0	-9.19	0.0	4.56
III.32	3.44	-4.33	0.0	1.2	-0.222	14.7	1.23	1.5	-10.8	0.0	3.56
III.33	2.82	-3.21	0.0	0.0	0.0	8.12	1.34	0.0	-8.84	0.0	3.71
III.34	4.26	-4.72	4.1	0.89	0.656	14.5	1.22	3.95	-11.4	0.0	3.61
III.35	4.73	-4.85	0.0	0.0	0.145	15.0	1.25	2.21	-7.44	0.0	3.62

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори									
	SaadC	Se2C3O1s	SdssC	Se1C1O2ss	SeaC3S2da	Se1C2H1a	SeaC3C3ad	SeaC2C3aa	SeaC2C2aa	SssO
	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
III.13	-0.117	8.15	-0.47	4.53	1.06	-1.6	0.892	7.84	8.25	4.57
III.14	-0.214	16.2	-1.68	0.0	1.03	-1.96	0.851	7.74	8.2	0.0
III.15	-0.344	9.55	-0.498	10.2	0.988	-5.2	0.0	14.9	7.87	10.5
III.17	-0.428	9.42	-0.682	10.2	0.934	-5.57	0.0	13.4	7.56	10.4
III.18	-0.305	18.7	-0.852	10.3	1.03	-4.73	0.741	15.8	8.24	15.5
III.21	-0.269	9.41	-0.36	10.2	1.02	-3.81	0.0	15.6	8.08	10.5
III.22	-0.47	9.42	-0.81	10.2	0.905	-5.25	0.0	10.2	10.1	10.4
III.23	-0.114	9.25	-0.304	0.0	1.08	-3.66	0.892	14.5	19.9	0.0
III.24	-0.266	9.47	-0.363	10.3	1.01	-3.91	0.0	14.2	14.3	10.6
III.25	-0.279	9.2	-0.409	10.2	0.986	-2.64	0.0	11.2	2.73	10.5
III.26	-0.0605	10.1	-0.073	0.0	1.26	-1.59	1.02	8.67	8.61	5.23
III.27	-0.127	10.3	-0.196	0.0	1.45	-3.49	0.0	12.1	14.6	5.9
III.29	-0.11	8.82	-0.488	0.0	1.39	-1.01	0.0	4.99	9.28	5.84
III.30	-0.258	10.2	-0.554	0.0	1.39	-4.43	0.0	11.4	14.4	5.87
III.31	-0.124	10.2	-0.286	0.0	1.44	-2.71	0.0	12.7	12.1	5.92
III.32	-0.121	19.7	-0.298	0.0	1.46	-3.23	0.0	13.8	15.2	5.92
III.33	0.0531	0.0	0.0	0.0	1.56	-0.861	0.0	5.1	9.41	5.87
III.34	-0.14	19.8	-0.705	0.0	1.49	-3.76	0.0	13.6	15.3	11.0
III.35	-0.105	10.3	-0.235	0.0	1.49	-2.87	0.0	13.4	15.1	6.02

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори									
	SaasC	Se2C3O1a	SdO	Se1C3N2ds	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SssCH2	SeaC3C3da	Se1C3C3ad	Se1C3O2as
	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
III.13	0.334	8.49	22.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.208	8.64	33.7	2.15	0.225	-0.146	-0.466	0.0	0.0	0.0
III.15	1.23	9.39	47.7	2.32	0.0	-0.248	0.0	0.711	0.652	8.94
III.17	-0.214	9.33	25.0	2.18	0.0	-0.377	0.0	0.669	0.558	8.88
III.18	1.93	9.47	37.0	2.4	0.0	-0.196	0.287	0.0	0.0	9.01
III.21	2.32	9.32	25.0	2.36	0.0	-0.133	0.0	0.744	0.711	8.94
III.22	-0.789	9.33	25.1	2.09	0.0	-0.499	0.0	0.648	0.493	8.86
III.23	2.8	8.93	24.7	2.27	0.0	-0.183	0.0	0.0	0.0	0.0
III.24	3.47	9.4	25.4	2.28	0.0	-0.236	0.0	0.731	0.662	8.97
III.25	2.16	9.25	24.8	2.19	0.0	-0.241	0.0	0.719	0.631	8.89
III.26	0.505	9.11	24.3	0.0	0.0	0.0	2.31	0.0	0.0	0.0
III.27	3.9	10.0	25.4	0.0	0.996	0.0	1.44	0.0	1.11	5.28
III.29	3.96	9.53	23.5	0.0	0.71	0.0	1.49	0.0	0.0	5.2
III.30	2.69	10.0	25.4	2.56	0.787	-0.243	1.05	0.0	0.0	5.26
III.31	5.22	10.0	25.4	2.68	0.904	-0.0584	1.43	0.0	0.0	5.28
III.32	5.09	10.1	36.9	2.78	0.945	-0.0291	1.44	0.0	0.0	5.31
III.33	4.34	9.73	12.3	0.0	0.0	0.0	2.52	0.0	0.0	5.25
III.34	4.79	10.4	37.6	2.8	0.941	-0.0645	1.62	0.0	0.0	5.46
III.35	5.19	10.2	25.5	2.76	0.956	-0.00246	1.43	0.0	0.0	5.43

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3N2as	SsF	Se1C2O2ss	SsCl	SeaC3N2aa	Se1C3H1s	Se1C3C3ss
	32	33	34	35	36	37	38
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	2.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	2.52	38.4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	2.82	0.0	4.42	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	2.77	0.0	0.0	5.83	0.0	0.0	0.0
III.22	2.35	39.3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	2.55	0.0	0.0	0.0	7.09	0.0	0.0
III.24	2.56	0.0	0.0	0.0	7.14	0.0	0.0
III.25	2.42	0.0	0.0	0.0	3.09	0.0	0.0
III.26	0.0	0.0	10.1	0.0	0.0	0.0	0.0
III.27	0.0	13.1	5.39	0.0	0.0	-3.47	0.935
III.29	0.0	0.0	5.32	0.0	0.0	-3.32	0.947
III.30	2.76	38.8	5.37	0.0	0.0	-3.6	0.881
III.31	2.92	0.0	5.39	11.9	0.0	-3.49	0.928
III.32	3.07	0.0	5.42	0.0	0.0	-3.51	0.933
III.33	0.0	0.0	5.37	0.0	0.0	-3.19	1.03
III.34	3.08	0.0	10.1	0.0	0.0	-2.11	0.0
III.35	3.03	0.0	5.59	5.9	0.0	-2.07	0.0

Продовж. дод. А.4

Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори										
	ALogPS_logP	ALogPS_logS	Se1C3O2ds	Se1C3C3da	Se1C1H1s	SaaCH	SaaS	SsCH3	SsH	SaaaC	SeaC3C3aa
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
III.12	1.76	-2.54	0.0	0.156	0.0	8.48	0.76	0.0	1.22	1.25	1.18
III.16	4.08	-5.01	0.0	0.597	0.0	12.7	0.754	0.0	-5.41	1.11	1.22
III.19	4.39	-5.41	0.0	0.765	0.0	22.4	0.964	0.0	-1.22	4.26	5.09
III.20	4.15	-5.78	0.0	0.0	-1.35	18.4	0.877	3.0	-4.23	3.82	6.94
III.28	4.12	-4.75	0.0	0.0	0.0	14.8	1.26	0.0	-9.18	0.0	3.58

Продовж. дод. А.4

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори									
	SaadC	Se2C3O1s	SdssC	Se1C1O2ss	SeaC3S2da	Se1C2H1a	SeaC3C3ad	SeaC2C3aa	SeaC2C2aa	SssO
	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
III.12	-0.208	7.19	-1.06	0.0	0.91	-1.81	0.794	7.24	8.03	0.0
III.16	-0.276	9.2	-0.623	0.0	1.01	-5.39	0.83	13.7	13.1	0.0
III.19	-0.107	9.61	-0.282	0.0	1.12	-4.67	0.916	17.8	22.9	0.0
III.20	-0.259	9.84	-0.341	10.3	1.04	-5.01	0.0	17.6	17.2	10.6
III.28	-0.0792	10.4	-0.0885	0.0	1.48	-2.78	0.0	13.4	15.0	5.92

Продовж. дод. А.4

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори									
	SaasC	Se2C3O1a	SdO	Se1C3N2ds	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SssCH2	SeaC3C3da	Se1C3C3ad	Se1C3O2as
	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
III.12	0.0775	8.23	22.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	-0.703	8.86	24.3	2.17	0.0	-0.324	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	1.08	9.06	24.8	2.45	0.0	-0.155	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	1.81	9.53	25.5	2.46	0.0	-0.208	0.0	0.755	0.726	9.04
III.28	5.16	10.0	25.5	0.0	1.05	0.0	1.58	0.0	1.19	5.29

Продовж. дод. А.4

Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору сполук №1 (модель *RFR*)

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3N2as	SsF	Se1C2O2ss	SsCl	SeaC3N2aa	Se1C3H1s	Se1C3C3ss
	32	33	34	35	36	37	38
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	2.51	38.1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	2.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.28	0.0	0.0	5.4	5.91	0.0	-3.44	0.952

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	ALogPS logP	ALogPS logS	SdssC	SaaCH	SaaS	SsCH3	SsH
	1	2	3	4	5	6	7
III.13	2.02	-3.07	-0.47	8.85	0.909	1.3	-3.25
III.14	1.09	-3.26	-1.68	8.52	0.806	0.0	-3.22
III.17	3.99	-5.16	-0.682	8.94	0.667	2.84	-8.65
III.18	3.41	-5.19	-0.852	11.3	0.82	4.68	-8.82
III.19	4.39	-5.41	-0.282	22.4	0.964	0.0	-1.22
III.20	4.15	-5.78	-0.341	18.4	0.877	3.0	-4.23
III.21	3.67	-5.23	-0.36	11.8	0.857	2.98	-4.98
III.22	3.95	-5.1	-0.81	9.21	0.612	2.81	-8.62
III.23	4.25	-5.1	-0.304	20.8	1.78	0.0	-0.922
III.24	3.98	-5.36	-0.363	16.8	1.66	3.0	-3.9
III.25	2.31	-3.53	-0.409	6.7	0.838	4.75	-4.93
III.26	1.43	-2.82	-0.073	9.16	1.02	0.0	-8.23
III.28	4.12	-4.75	-0.0885	14.8	1.26	0.0	-9.18
III.30	4.39	-5.13	-0.554	12.2	1.12	0.0	-13.1
III.31	4.67	-5.0	-0.286	12.9	1.23	0.0	-9.19
III.32	3.44	-4.33	-0.298	14.7	1.23	1.5	-10.8
III.33	2.82	-3.21	0.0	8.12	1.34	0.0	-8.84
III.34	4.26	-4.72	-0.705	14.5	1.22	3.95	-11.4
III.35	4.73	-4.85	-0.235	15.0	1.25	2.21	-7.44
III.36	2.8	-3.9	-2.42	5.1	0.914	3.54	-7.92
III.38	1.8	-3.1	-2.34	7.34	0.952	3.79	-2.6
III.39	2.61	-3.54	-2.33	7.54	0.961	4.11	-3.89
III.40	3.67	-4.59	-0.502	14.1	1.1	1.59	-9.51
III.41	3.57	-4.65	-0.562	12.1	1.08	3.09	-11.3
III.42	5.17	-4.98	-0.458	14.9	1.13	4.23	-9.07
III.44	3.43	-4.17	-0.642	13.3	1.02	0.0	-5.08
III.45	2.89	-4.02	-0.719	12.6	1.01	0.0	-2.39
III.46	3.07	-4.14	-0.552	14.1	1.04	1.91	-4.35

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори								
	SaaaC	SssO	SaasC	SaadC	SdO	SssCH2	SssNH	SsOH	SsF
	8	9	10	11	12	13	14	15	16
III.13	1.4	4.57	0.334	-0.117	22.9	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	1.22	0.0	0.208	-0.214	33.7	-0.466	2.22	8.46	0.0
III.17	0.72	10.4	-0.214	-0.428	25.0	0.0	2.39	0.0	38.4
III.18	0.946	15.5	1.93	-0.305	37.0	0.287	2.72	0.0	0.0
III.19	4.26	0.0	1.08	-0.107	24.8	0.0	2.9	0.0	0.0
III.20	3.82	10.6	1.81	-0.259	25.5	0.0	2.89	0.0	0.0
III.21	1.01	10.5	2.32	-0.269	25.0	0.0	2.75	0.0	0.0
III.22	0.648	10.4	-0.789	-0.47	25.1	0.0	2.23	0.0	39.3
III.23	1.4	0.0	2.8	-0.114	24.7	0.0	2.8	0.0	0.0
III.24	1.02	10.6	3.47	-0.266	25.4	0.0	2.8	0.0	0.0
III.25	0.994	10.5	2.16	-0.279	24.8	0.0	2.63	0.0	0.0
III.26	1.49	5.23	0.505	-0.0605	24.3	2.31	0.0	0.0	0.0
III.28	0.0	5.92	5.16	-0.0792	25.5	1.58	0.0	0.0	0.0
III.30	0.0	5.87	2.69	-0.258	25.4	1.05	2.48	0.0	38.8
III.31	0.0	5.92	5.22	-0.124	25.4	1.43	2.79	0.0	0.0
III.32	0.0	5.92	5.09	-0.121	36.9	1.44	2.82	0.0	0.0
III.33	0.0	5.87	4.34	0.0531	12.3	2.52	0.0	0.0	0.0
III.34	0.0	11.0	4.79	-0.14	37.6	1.62	2.82	0.0	0.0
III.35	0.0	6.02	5.19	-0.105	25.5	1.43	2.84	0.0	0.0
III.36	0.0	11.2	2.64	-0.305	36.0	1.84	0.0	19.6	0.0
III.38	0.0	0.0	2.85	-0.27	35.5	-0.435	0.0	19.3	0.0
III.39	0.0	0.0	2.95	-0.265	35.8	1.26	0.0	19.5	0.0
III.40	0.0	5.27	4.17	-0.167	39.1	0.474	0.0	0.0	0.0
III.41	0.0	10.9	4.34	-0.193	39.4	0.395	0.0	0.0	0.0
III.42	0.0	0.0	4.72	-0.148	39.6	2.3	0.0	0.0	0.0
III.44	0.0	0.0	2.9	-0.226	38.9	0.312	0.0	10.6	0.0
III.45	0.0	0.0	2.29	-0.239	38.9	0.259	0.0	20.1	0.0
III.46	0.0	0.0	3.52	-0.211	39.1	0.371	0.0	10.6	0.0

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори							
	SssssC	SsCl	SaaN	SsssN	SssS	SsssCH	SaasN	SaaNH
	17	18	19	20	21	22	23	24
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	-4.52	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	0.0	5.83	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.22	-4.62	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	0.0	0.0	4.47	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.24	0.0	0.0	4.48	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.25	0.0	0.0	3.82	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.26	0.0	0.0	0.0	1.74	0.0	0.0	0.0	0.0
III.28	0.0	5.91	0.0	0.0	1.66	0.497	1.63	0.0
III.30	-4.5	0.0	0.0	0.0	1.52	0.259	1.42	0.0
III.31	0.0	11.9	0.0	0.0	1.62	0.442	1.58	0.0
III.32	0.0	0.0	0.0	0.0	1.63	0.44	1.58	0.0
III.33	0.0	0.0	0.0	0.0	1.73	0.664	1.78	0.0
III.34	-0.121	0.0	0.0	0.0	1.62	0.0612	1.57	0.0
III.35	-0.0906	5.9	0.0	0.0	1.64	0.0944	1.6	0.0
III.36	-1.61	0.0	0.0	0.0	1.17	-0.815	0.0	2.73
III.38	-1.52	0.0	0.0	1.92	1.2	-0.701	0.0	2.73
III.39	-1.52	0.0	0.0	2.17	1.2	-0.702	0.0	2.75
III.40	-0.978	5.99	0.0	1.26	1.43	-0.41	0.0	2.88
III.41	-1.04	6.0	0.0	1.24	1.41	-0.494	0.0	2.87
III.42	-0.962	6.02	0.0	3.54	1.45	-0.382	0.0	2.92
III.44	-1.1	5.96	0.0	1.2	1.37	-0.604	0.0	2.82
III.45	-1.13	0.0	0.0	1.15	1.35	-0.627	0.0	2.8
III.46	-1.07	0.0	0.0	1.26	1.39	-0.579	0.0	2.83

Продовж. дод. А.5

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №2 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	ALogPS_logP	ALogPS_logS	SdssC	SaaCH	SaaS	SsCH3	SsH
	1	2	3	4	5	6	7
III.12	1.76	-2.54	-1.06	8.48	0.76	0.0	1.22
III.15	2.5	-4.3	-0.498	10.3	0.771	2.91	-4.77
III.16	4.08	-5.01	-0.623	12.7	0.754	0.0	-5.41
III.27	3.58	-4.36	-0.196	13.4	1.22	0.0	-10.9
III.29	1.48	-3.29	-0.488	7.98	1.23	0.0	-5.63
III.37	2.23	-3.88	-2.65	3.91	0.787	1.79	-11.1
III.43	4.0	-4.77	-0.468	14.7	1.12	3.93	-7.8

Продовж. дод. А.5

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №2 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори								
	SaaaC	SssO	SaasC	SaadC	SdO	SssCH2	SssNH	SsOH	SsF
	8	9	10	11	12	13	14	15	16
III.12	1.25	0.0	0.0775	-0.208	22.1	0.0	0.0	8.74	0.0
III.15	0.872	10.5	1.23	-0.344	47.7	0.0	2.62	0.0	0.0
III.16	1.11	0.0	-0.703	-0.276	24.3	0.0	2.4	0.0	38.1
III.27	0.0	5.9	3.9	-0.127	25.4	1.44	0.0	0.0	13.1
III.29	0.0	5.84	3.96	-0.11	23.5	1.49	0.0	0.0	0.0
III.37	0.0	9.71	0.791	-0.411	35.8	-0.8	0.0	19.4	26.6
III.43	0.0	0.0	4.62	-0.152	39.3	0.508	0.0	0.0	0.0

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №2 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори							
	SssssC	SsCl	SaaN	SsssN	SssS	SsssCH	SaasN	SaaNH
	17	18	19	20	21	22	23	24
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	-4.49	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.27	0.0	0.0	0.0	0.0	1.62	0.438	1.57	0.0
III.29	0.0	0.0	0.0	0.0	1.62	0.528	1.52	0.0
III.37	-5.24	0.0	0.0	0.0	1.06	-1.02	0.0	2.63
III.43	-0.959	6.0	0.0	3.28	1.44	-0.382	0.0	2.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	ALogPS logP	ALogPS logS	Se1C3O2ds	Se1C3C3da	Se1C1H1s	SaaCH
	1	2	3	4	5	6
III.13	2.02	-3.07	3.46	0.621	-0.409	8.85
III.14	1.09	-3.26	0.0	0.64	0.0	8.52
III.17	3.99	-5.16	0.0	0.0	-1.52	8.94
III.18	3.41	-5.19	3.99	1.53	-0.818	11.3
III.19	4.39	-5.41	0.0	0.765	0.0	22.4
III.20	4.15	-5.78	0.0	0.0	-1.35	18.4
III.21	3.67	-5.23	0.0	0.0	-1.25	11.8
III.22	3.95	-5.1	0.0	0.0	-1.57	9.21
III.23	4.25	-5.1	0.0	0.701	0.0	20.8
III.24	3.98	-5.36	0.0	0.0	-1.35	16.8
III.25	2.31	-3.53	0.0	0.0	-1.32	6.7
III.26	1.43	-2.82	0.0	1.12	0.0	9.16
III.28	4.12	-4.75	0.0	0.0	0.0	14.8
III.30	4.39	-5.13	0.0	0.0	0.0	12.2
III.31	4.67	-5.0	0.0	0.0	0.0	12.9
III.32	3.44	-4.33	0.0	1.2	-0.222	14.7
III.33	2.82	-3.21	0.0	0.0	0.0	8.12
III.34	4.26	-4.72	4.1	0.89	0.656	14.5
III.35	4.73	-4.85	0.0	0.0	0.145	15.0
III.36	2.8	-3.9	0.0	0.0	0.579	5.1
III.38	1.8	-3.1	0.0	0.0	0.331	7.34
III.39	2.61	-3.54	0.0	0.0	1.82	7.54
III.40	3.67	-4.59	0.0	0.0	-0.256	14.1
III.41	3.57	-4.65	0.0	0.0	-1.24	12.1
III.42	5.17	-4.98	0.0	0.0	1.91	14.9
III.44	3.43	-4.17	0.0	0.0	0.0	13.3
III.45	2.89	-4.02	0.0	0.0	0.0	12.6
III.46	3.07	-4.14	0.0	0.0	0.0325	14.1

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори							
	SaaS	SsCH3	SsH	SaaaC	SeaC3C3aa	SaadC	Se2C3O1s	SdssC
	7	8	9	10	11	12	13	14
III.13	0.909	1.3	-3.25	1.4	1.28	-0.117	8.15	-0.47
III.14	0.806	0.0	-3.22	1.22	1.24	-0.214	16.2	-1.68
III.17	0.667	2.84	-8.65	0.72	2.95	-0.428	9.42	-0.682
III.18	0.82	4.68	-8.82	0.946	3.14	-0.305	18.7	-0.852
III.19	0.964	0.0	-1.22	4.26	5.09	-0.107	9.61	-0.282
III.20	0.877	3.0	-4.23	3.82	6.94	-0.259	9.84	-0.341
III.21	0.857	2.98	-4.98	1.01	3.14	-0.269	9.41	-0.36
III.22	0.612	2.81	-8.62	0.648	3.36	-0.47	9.42	-0.81
III.23	1.78	0.0	-0.922	1.4	1.28	-0.114	9.25	-0.304
III.24	1.66	3.0	-3.9	1.02	3.12	-0.266	9.47	-0.363
III.25	0.838	4.75	-4.93	0.994	3.08	-0.279	9.2	-0.409
III.26	1.02	0.0	-8.23	1.49	1.41	-0.0605	10.1	-0.073
III.28	1.26	0.0	-9.18	0.0	3.58	-0.0792	10.4	-0.0885
III.30	1.12	0.0	-13.1	0.0	3.44	-0.258	10.2	-0.554
III.31	1.23	0.0	-9.19	0.0	4.56	-0.124	10.2	-0.286
III.32	1.23	1.5	-10.8	0.0	3.56	-0.121	19.7	-0.298
III.33	1.34	0.0	-8.84	0.0	3.71	0.0531	0.0	0.0
III.34	1.22	3.95	-11.4	0.0	3.61	-0.14	19.8	-0.705
III.35	1.25	2.21	-7.44	0.0	3.62	-0.105	10.3	-0.235
III.36	0.914	3.54	-7.92	0.0	2.76	-0.305	19.2	-2.42
III.38	0.952	3.79	-2.6	0.0	1.42	-0.27	18.8	-2.34
III.39	0.961	4.11	-3.89	0.0	1.46	-0.265	19.1	-2.33
III.40	1.1	1.59	-9.51	0.0	1.57	-0.167	22.6	-0.502
III.41	1.08	3.09	-11.3	0.0	2.81	-0.193	22.8	-0.562
III.42	1.13	4.23	-9.07	0.0	1.66	-0.148	23.2	-0.458
III.44	1.02	0.0	-5.08	0.0	2.59	-0.226	22.3	-0.642
III.45	1.01	0.0	-2.39	0.0	2.55	-0.239	22.3	-0.719
III.46	1.04	1.91	-4.35	0.0	2.65	-0.211	22.8	-0.552

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C1O2ss	SeaC3S2aa	SeaC3S2da	Se1C2H1a	SeaC3C3ad	SeaC2C3aa
	15	16	17	18	19	20
III.13	4.53	1.26	1.06	-1.6	0.892	7.84
III.14	0.0	1.24	1.03	-1.96	0.851	7.74
III.17	10.2	1.17	0.934	-5.57	0.0	13.4
III.18	10.3	1.29	1.03	-4.73	0.741	15.8
III.19	0.0	1.36	1.12	-4.67	0.916	17.8
III.20	10.3	1.31	1.04	-5.01	0.0	17.6
III.21	10.2	1.29	1.02	-3.81	0.0	15.6
III.22	10.2	1.13	0.905	-5.25	0.0	10.2
III.23	0.0	2.37	1.08	-3.66	0.892	14.5
III.24	10.3	2.31	1.01	-3.91	0.0	14.2
III.25	10.2	1.23	0.986	-2.64	0.0	11.2
III.26	0.0	1.57	1.26	-1.59	1.02	8.67
III.28	0.0	2.03	1.48	-2.78	0.0	13.4
III.30	0.0	1.95	1.39	-4.43	0.0	11.4
III.31	0.0	2.0	1.44	-2.71	0.0	12.7
III.32	0.0	2.02	1.46	-3.23	0.0	13.8
III.33	0.0	2.1	1.56	-0.861	0.0	5.1
III.34	0.0	2.06	1.49	-3.76	0.0	13.6
III.35	0.0	2.06	1.49	-2.87	0.0	13.4
III.36	5.59	1.66	1.17	-2.34	0.0	9.38
III.38	0.0	1.67	1.17	-2.27	0.0	10.0
III.39	0.0	1.72	1.21	-2.24	0.0	10.7
III.40	5.3	1.83	1.29	-4.45	0.0	17.9
III.41	10.9	1.81	1.27	-4.48	0.0	17.7
III.42	0.0	1.93	1.36	-4.19	0.0	19.9
III.44	0.0	1.71	1.2	-4.55	0.0	12.2
III.45	0.0	1.69	1.18	-5.37	0.0	11.3
III.46	0.0	1.74	1.23	-4.02	0.0	13.7

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SeaC2C2aa	SssO	SaasC	Se2C3O1a	Se1C3O1ds	Se1H1O1s	
	21	22	23	24	25	26	27
III.13	8.25	4.57	0.334	8.49	0.0	0.0	0.0
III.14	8.2	0.0	0.208	8.64	6.25	3.51	2.15
III.17	7.56	10.4	-0.214	9.33	0.0	0.0	2.18
III.18	8.24	15.5	1.93	9.47	0.0	0.0	2.4
III.19	22.9	0.0	1.08	9.06	0.0	0.0	2.45
III.20	17.2	10.6	1.81	9.53	0.0	0.0	2.46
III.21	8.08	10.5	2.32	9.32	0.0	0.0	2.36
III.22	10.1	10.4	-0.789	9.33	0.0	0.0	2.09
III.23	19.9	0.0	2.8	8.93	0.0	0.0	2.27
III.24	14.3	10.6	3.47	9.4	0.0	0.0	2.28
III.25	2.73	10.5	2.16	9.25	0.0	0.0	2.19
III.26	8.61	5.23	0.505	9.11	0.0	0.0	0.0
III.28	15.0	5.92	5.16	10.0	0.0	0.0	0.0
III.30	14.4	5.87	2.69	10.0	0.0	0.0	2.56
III.31	12.1	5.92	5.22	10.0	0.0	0.0	2.68
III.32	15.2	5.92	5.09	10.1	0.0	0.0	2.78
III.33	9.41	5.87	4.34	9.73	0.0	0.0	0.0
III.34	15.3	11.0	4.79	10.4	0.0	0.0	2.8
III.35	15.1	6.02	5.19	10.2	0.0	0.0	2.76
III.36	3.15	11.2	2.64	9.14	16.0	8.57	0.0
III.38	6.43	0.0	2.85	8.98	15.7	8.43	0.0
III.39	6.78	0.0	2.95	9.12	16.0	8.59	0.0
III.40	12.0	5.27	4.17	9.22	0.0	0.0	0.0
III.41	8.8	10.9	4.34	9.32	0.0	0.0	0.0
III.42	12.9	0.0	4.72	9.48	0.0	0.0	0.0
III.44	14.2	0.0	2.9	9.1	0.0	4.63	0.0
III.45	13.9	0.0	2.29	9.1	0.0	8.77	0.0
III.46	14.9	0.0	3.52	9.18	0.0	4.68	0.0

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C2H1s	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SssCH2	SsF	SeaC3C3da	Se1C3C3ad
	28	29	30	31	32	33	34
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	-3.0	0.225	-0.146	-0.466	0.0	0.0	0.0
III.17	0.0	0.0	-0.377	0.0	38.4	0.669	0.558
III.18	-1.9	0.0	-0.196	0.287	0.0	0.0	0.0
III.19	0.0	0.0	-0.155	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	0.0	0.0	-0.208	0.0	0.0	0.755	0.726
III.21	0.0	0.0	-0.133	0.0	0.0	0.744	0.711
III.22	0.0	0.0	-0.499	0.0	39.3	0.648	0.493
III.23	0.0	0.0	-0.183	0.0	0.0	0.0	0.0
III.24	0.0	0.0	-0.236	0.0	0.0	0.731	0.662
III.25	0.0	0.0	-0.241	0.0	0.0	0.719	0.631
III.26	-6.88	0.0	0.0	2.31	0.0	0.0	0.0
III.28	-7.32	1.05	0.0	1.58	0.0	0.0	1.19
III.30	-8.04	0.787	-0.243	1.05	38.8	0.0	0.0
III.31	-7.57	0.904	-0.0584	1.43	0.0	0.0	0.0
III.32	-7.64	0.945	-0.0291	1.44	0.0	0.0	0.0
III.33	-7.65	0.0	0.0	2.52	0.0	0.0	0.0
III.34	-10.3	0.941	-0.0645	1.62	0.0	0.0	0.0
III.35	-8.06	0.956	-0.00246	1.43	0.0	0.0	0.0
III.36	-11.8	0.423	0.0	1.84	0.0	0.0	0.0
III.38	-7.09	0.439	0.0	-0.435	0.0	0.0	0.0
III.39	-10.4	0.469	0.0	1.26	0.0	0.0	0.0
III.40	-6.39	1.12	0.0	0.474	0.0	0.0	0.0
III.41	-6.65	1.1	0.0	0.395	0.0	0.0	0.0
III.42	-9.71	1.19	0.0	2.3	0.0	0.0	0.0
III.44	-6.64	1.04	0.0	0.312	0.0	0.0	0.0
III.45	-6.8	1.0	0.0	0.259	0.0	0.0	0.0
III.46	-6.64	1.1	0.0	0.371	0.0	0.0	0.0

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3O2as	Se1C3N2as	SssssC	Se1C1C2ss	Se1C2O2ss	SsCl	SeaC3N2aa
	35	36	37	38	39	40	41
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	8.88	2.52	-4.52	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	9.01	2.82	0.0	2.39	4.42	0.0	0.0
III.19	0.0	2.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	9.04	2.9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	8.94	2.77	0.0	0.0	0.0	5.83	0.0
III.22	8.86	2.35	-4.62	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	0.0	2.55	0.0	0.0	0.0	0.0	7.09
III.24	8.97	2.56	0.0	0.0	0.0	0.0	7.14
III.25	8.89	2.42	0.0	0.0	0.0	0.0	3.09
III.26	0.0	0.0	0.0	0.0	10.1	0.0	0.0
III.28	5.29	0.0	0.0	0.0	5.4	5.91	0.0
III.30	5.26	2.76	-4.5	0.0	5.37	0.0	0.0
III.31	5.28	2.92	0.0	0.0	5.39	11.9	0.0
III.32	5.31	3.07	0.0	0.0	5.42	0.0	0.0
III.33	5.25	0.0	0.0	0.0	5.37	0.0	0.0
III.34	5.46	3.08	-0.121	2.44	10.1	0.0	0.0
III.35	5.43	3.03	-0.091	0.0	5.59	5.9	0.0
III.36	10.4	0.0	-1.61	3.16	5.4	0.0	2.96
III.38	0.0	0.0	-1.52	0.0	0.0	0.0	2.94
III.39	0.0	0.0	-1.52	6.09	0.0	0.0	2.99
III.40	4.73	0.0	-0.978	0.0	0.0	5.99	3.08
III.41	9.75	0.0	-1.04	0.0	0.0	6.0	3.08
III.42	0.0	0.0	-0.962	6.22	0.0	6.02	3.19
III.44	0.0	0.0	-1.1	0.0	0.0	5.96	2.98
III.45	0.0	0.0	-1.13	0.0	0.0	0.0	2.97
III.46	0.0	0.0	-1.07	0.0	0.0	0.0	3.02

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SaaN	Se1C2N3ss	Se1C3N3ds	SsssN	Se1C2C2ss	Se1C3H1s	Se1C3C3as
	42	43	44	45	46	47	48
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.22	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	4.47	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.24	4.48	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.25	3.82	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.26	0.0	4.9	2.07	1.74	3.33	0.0	0.0
III.28	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-3.44	2.79
III.30	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-3.6	2.65
III.31	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-3.49	2.74
III.32	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-3.51	2.76
III.33	0.0	0.0	0.0	0.0	1.52	-3.19	2.93
III.34	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-2.11	2.76
III.35	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-2.07	1.41
III.36	0.0	0.0	0.0	0.0	4.11	-2.7	0.876
III.38	0.0	0.0	0.0	1.92	0.0	-2.55	0.962
III.39	0.0	5.79	0.0	2.17	0.0	-2.57	1.01
III.40	0.0	0.0	3.61	1.26	0.0	-2.45	1.15
III.41	0.0	0.0	3.59	1.24	0.0	-2.57	1.08
III.42	0.0	5.94	3.77	3.54	0.0	-2.48	1.27
III.44	0.0	0.0	3.45	1.2	0.0	-2.6	0.852
III.45	0.0	0.0	3.35	1.15	0.0	-2.63	0.861
III.46	0.0	0.0	3.63	1.26	0.0	-2.6	0.918

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	SeaC3N3aa	Se1C3C3ss	SsssCH	Se1C3C4ss	Se1C2C4ss	Se1C3C3sa
	49	50	51	52	53	54
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.22	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.24	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.25	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.26	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.28	2.33	0.952	0.497	0.0	0.0	0.0
III.30	2.22	0.881	0.259	0.0	0.0	0.0
III.31	2.28	0.928	0.442	0.0	0.0	0.0
III.32	2.31	0.933	0.44	0.0	0.0	0.0
III.33	2.46	1.03	0.664	0.0	0.0	0.0
III.34	2.35	0.0	0.0612	0.607	2.37	0.0
III.35	2.34	0.0	0.0944	0.624	2.39	1.37
III.36	0.0	0.0	-0.815	-0.369	0.321	0.802
III.38	0.0	0.0	-0.701	-0.294	0.41	0.853
III.39	0.0	0.0	-0.702	-0.27	0.458	0.893
III.40	0.0	0.0	-0.41	0.0475	1.24	1.06
III.41	0.0	0.0	-0.494	-0.0214	1.16	1.01
III.42	0.0	0.0	-0.382	0.107	1.35	1.15
III.44	0.0	0.0	-0.604	-0.122	1.02	0.888
III.45	0.0	0.0	-0.627	-0.158	0.949	0.825
III.46	0.0	0.0	-0.579	-0.0949	1.09	0.882

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори				
	SaaNH	Se1H1N2a	Se1C3C4ds	Se1C3N3as	Se1C3O1as
	55	56	57	58	59
III.13	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.14	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.18	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.20	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.22	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.23	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.24	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.25	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.26	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.28	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.30	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.31	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.32	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.33	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.34	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.35	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.36	2.73	-0.055	-0.232	0.0	0.0
III.38	2.73	-0.0243	-0.196	2.55	0.0
III.39	2.75	-0.013	-0.167	2.94	0.0
III.40	2.88	0.0296	0.423	1.99	0.0
III.41	2.87	-1.7E-4	0.385	1.98	0.0
III.42	2.92	0.0563	0.488	5.09	0.0
III.44	2.82	-0.0244	0.31	1.92	8.86
III.45	2.8	-0.0413	0.267	1.85	16.5
III.46	2.83	-0.0127	0.356	2.05	8.94

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	ALogPS logP	ALogPS logS	Se1C3O2ds	Se1C3C3da	Se1C1H1s	SaaCH
	1	2	3	4	5	6
III.12	1.76	-2.54	0.0	0.156	0.0	8.48
III.15	2.5	-4.3	0.0	0.0	-1.43	10.3
III.16	4.08	-5.01	0.0	0.597	0.0	12.7
III.27	3.58	-4.36	0.0	0.0	0.0	13.4
III.29	1.48	-3.29	0.0	0.0	0.0	7.98
III.37	2.23	-3.88	0.0	0.0	-3.19	3.91
III.43	4.0	-4.77	0.0	0.0	0.446	14.7

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори							
	SaaS	SsCH3	SsH	SaaaC	SeaC3C3aa	SaadC	Se2C3O1s	SdssC
	7	8	9	10	11	12	13	14
III.12	0.76	0.0	1.22	1.25	1.18	-0.208	7.19	-1.06
III.15	0.771	2.91	-4.77	0.872	3.06	-0.344	9.55	-0.498
III.16	0.754	0.0	-5.41	1.11	1.22	-0.276	9.2	-0.623
III.27	1.22	0.0	-10.9	0.0	3.54	-0.127	10.3	-0.196
III.29	1.23	0.0	-5.63	0.0	3.48	-0.11	8.82	-0.488
III.37	0.787	1.79	-11.1	0.0	2.07	-0.411	18.8	-2.65
III.43	1.12	3.93	-7.8	0.0	1.62	-0.152	22.9	-0.468

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C1O2ss	SeaC3S2aa	SeaC3S2da	Se1C2H1a	SeaC3C3ad	SeaC2C3aa
	15	16	17	18	19	20
III.12	0.0	1.02	0.91	-1.81	0.794	7.24
III.15	10.2	1.24	0.988	-5.2	0.0	14.9
III.16	0.0	1.22	1.01	-5.39	0.83	13.7

III.27	0.0	2.01	1.45	-3.49	0.0	12.1
III.29	0.0	1.96	1.39	-1.01	0.0	4.99
III.37	5.23	1.53	1.06	-3.06	0.0	7.84
III.43	0.0	1.88	1.33	-4.23	0.0	19.1

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SeaC2C2aa	SssO	SaasC	Se2C3O1a	Se1C3O1ds	Se1H1O1s	Se1C3N2ds
	21	22	23	24	25	26	27
III.12	8.03	0.0	0.0775	8.23	6.0	3.39	0.0
III.15	7.87	10.5	1.23	9.39	0.0	0.0	2.32
III.16	13.1	0.0	-0.703	8.86	0.0	0.0	2.17
III.27	14.6	5.9	3.9	10.0	0.0	0.0	0.0
III.29	9.28	5.84	3.96	9.53	0.0	0.0	0.0
III.37	2.74	9.71	0.791	8.96	15.6	8.34	0.0
III.43	12.5	0.0	4.62	9.34	0.0	0.0	0.0

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C2H1s	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SssCH2	SsF	SeaC3C3da	Se1C3C3ad
	28	29	30	31	32	33	34
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	0.0	0.0	-0.248	0.0	0.0	0.711	0.652
III.16	0.0	0.0	-0.324	0.0	38.1	0.0	0.0
III.27	-7.46	0.996	0.0	1.44	13.1	0.0	1.11
III.29	-6.97	0.71	0.0	1.49	0.0	0.0	0.0
III.37	-7.66	0.325	0.0	-0.8	26.6	0.0	0.0
III.43	-6.4	1.16	0.0	0.508	0.0	0.0	0.0

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3O2as	Se1C3N2as	SssssC	Se1C1C2ss	Se1C2O2ss	SsCl	SeaC3N2aa
	35	36	37	38	39	40	41
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	8.94	2.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	0.0	2.51	-4.49	0.0	0.0	0.0	0.0
III.27	5.28	0.0	0.0	0.0	5.39	0.0	0.0
III.29	5.2	0.0	0.0	0.0	5.32	0.0	0.0
III.37	8.75	0.0	-5.24	0.0	0.0	0.0	2.84
III.43	0.0	0.0	-0.959	0.0	0.0	6.0	3.13

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SaaN	Se1C2N3ss	Se1C3N3ds	SsssN	Se1C2C2ss	Se1C3H1s	Se1C3C3as
	42	43	44	45	46	47	48
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.27	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-3.47	2.76
III.29	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-3.32	2.74
III.37	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	-2.8	0.689
III.43	0.0	0.0	3.69	3.28	0.0	-2.45	1.22

Продовж. дод. А.6

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

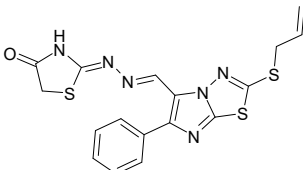
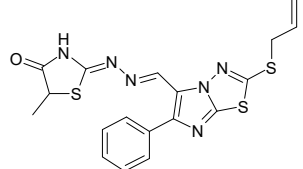
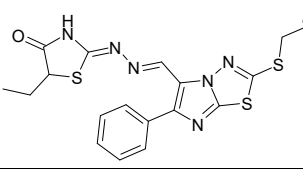
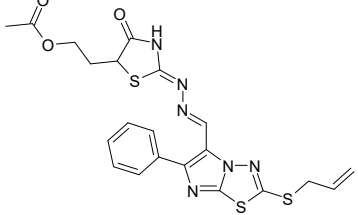
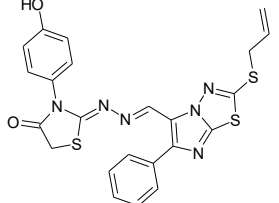
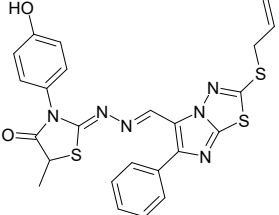
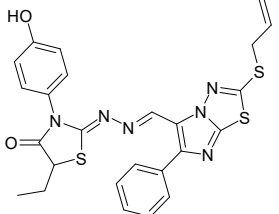
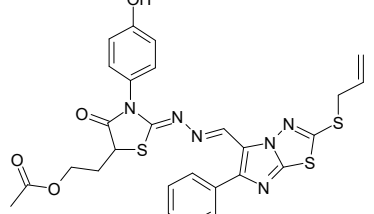
№ п/п	Дескриптори					
	SeaC3N3aa	Se1C3C3ss	SsssCH	Se1C3C4ss	Se1C2C4ss	Se1C3C3sa
	49	50	51	52	53	54
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

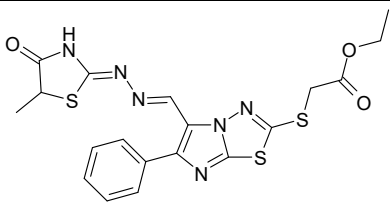
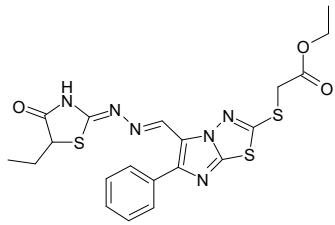
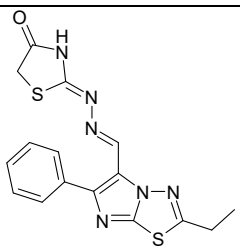
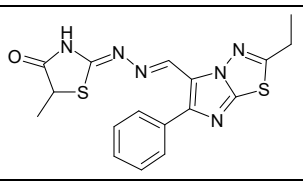
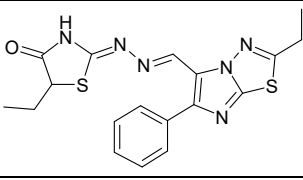
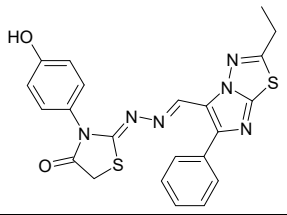
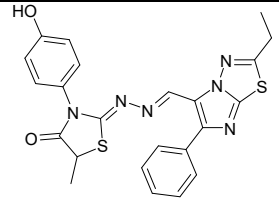
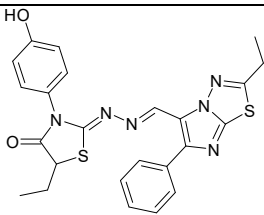
III.27	2.3	0.935	0.438	0.0	0.0	0.0
III.29	2.19	0.947	0.528	0.0	0.0	0.0
III.37	0.0	0.0	-1.02	-0.502	0.101	0.657
III.43	0.0	0.0	-0.382	0.0828	1.31	1.11

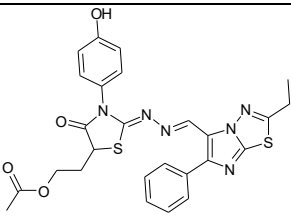
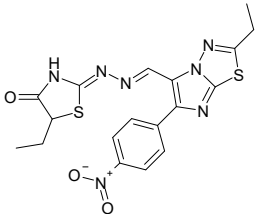
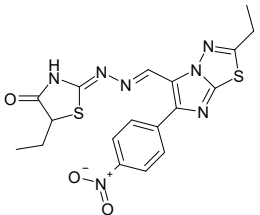
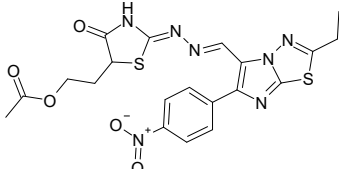
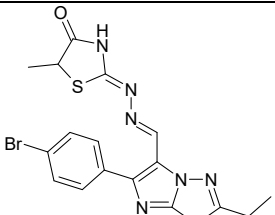
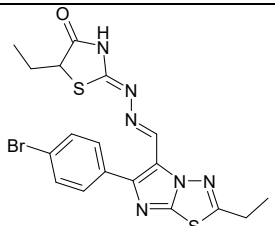
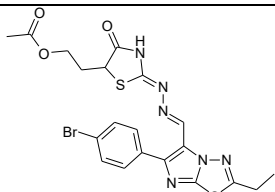
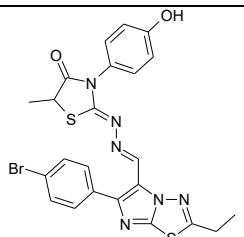
Продовж. дод. А.6

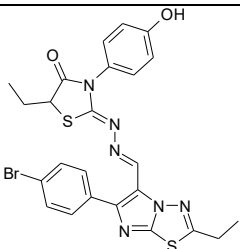
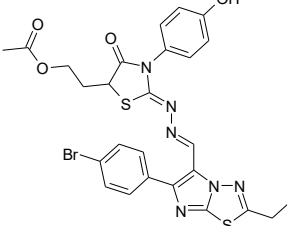
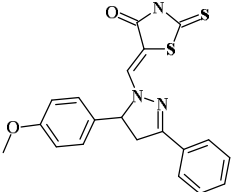
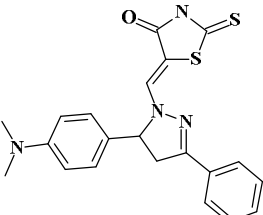
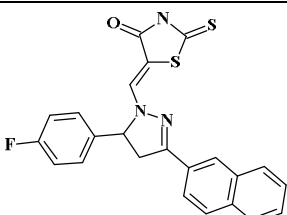
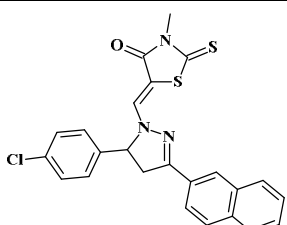
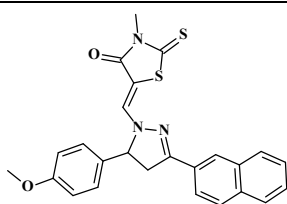
**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки набору сполук
№2 (модель *RFR*)**

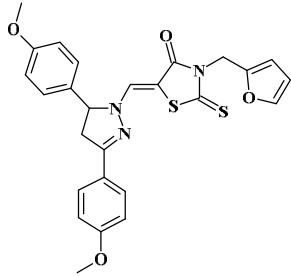
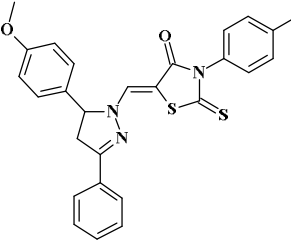
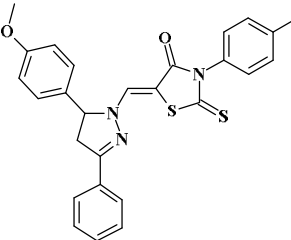
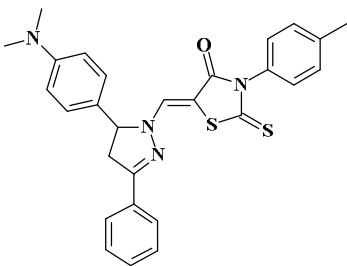
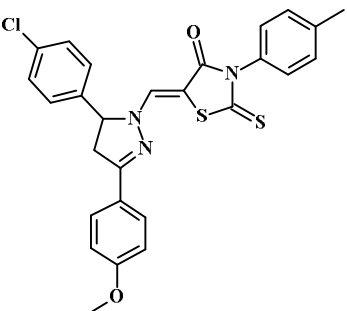
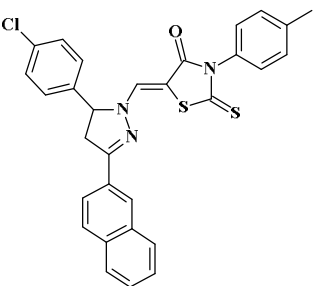
№ п/п	Дескриптори				
	SaaNH	Se1H1N2a	Se1C3C4ds	Se1C3N3as	Se1C3O1as
	55	56	57	58	59
III.12	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.15	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.16	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.27	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.29	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.37	2.63	-0.126	-0.347	0.0	0.0
III.43	2.9	0.045	0.459	4.67	0.0

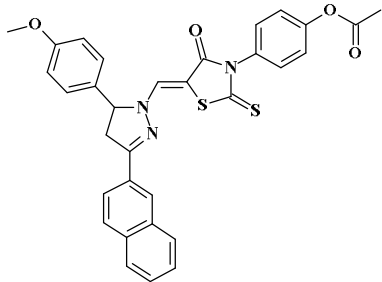
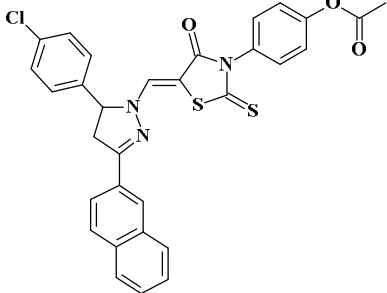
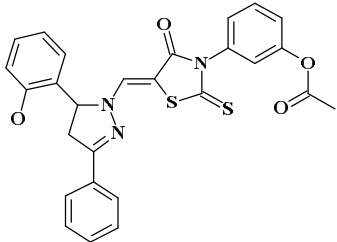
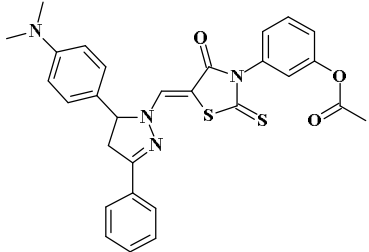
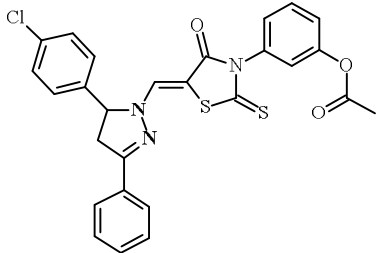
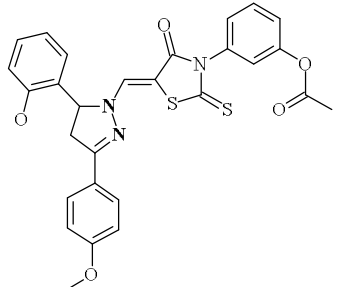
№ п/п	Структура	<i>Tb gambiense</i> , IC ₅₀ , мкМ	СВ	Посилання
1	2	3	4	5
III.47		3,9	0,7	[325]
III.48		4,4	0,7	[325]
III.49		20,6	4,7	[325]
III.50		5	0,6	[325]
III.51		>19,7	-	[325]
III.52		>19,2	-	[325]
III.53		3,6	1,3	[325]
III.54		1,007	0,039	[325]

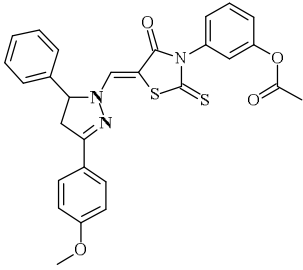
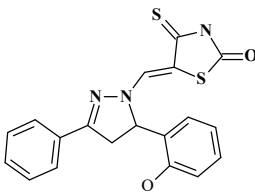
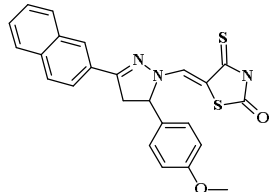
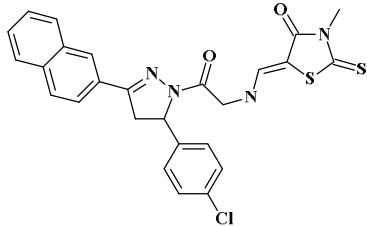
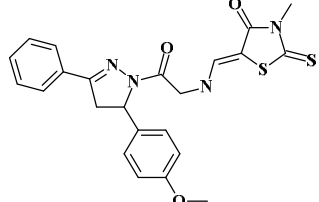
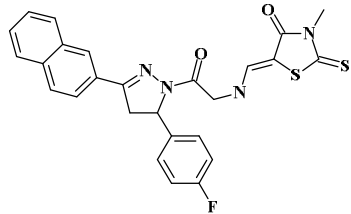
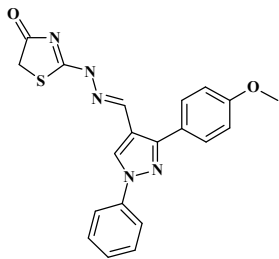
1	2	3	4	5
III.55		3,9	0,3	[325]
III.56		9,2	0,6	[325]
III.57		18,0	2,3	[325]
III.58		>26	-	[325]
III.59		3,7	0,1	[325]
III.60		9,2	0,5	[325]
III.61		4,8	0,2	[325]
III.62		>20,4	-	[325]

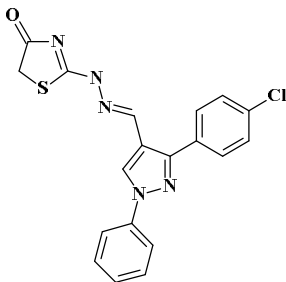
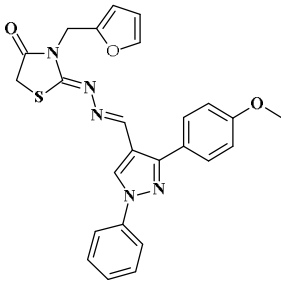
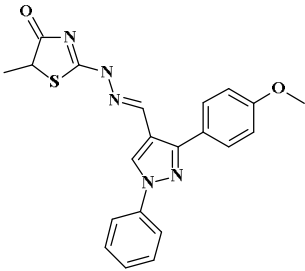
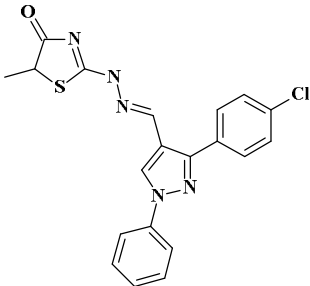
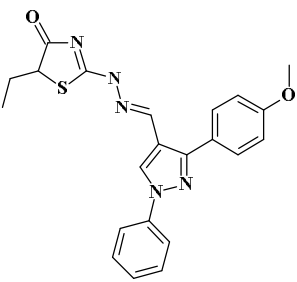
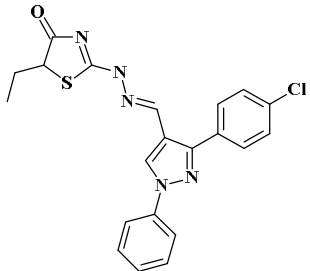
1	2	3	4	5
III.63		2,7	0,8	[325]
III.64		>22,5	-	[325]
III.64		>22,5	-	[325]
III.65		16,2	0,7	[325]
III.66		9,5	1,3	[325]
III.67		13,8	1,4	[325]
III.68		3,2	0,1	[325]
III.69		1,5	0,03	[325]

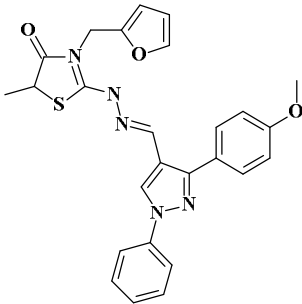
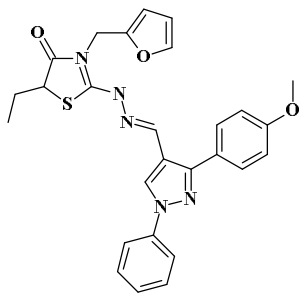
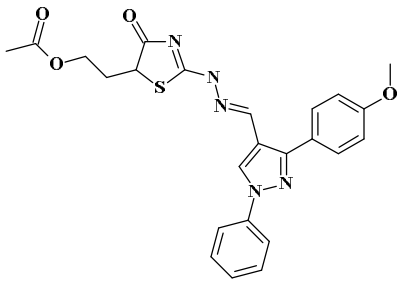
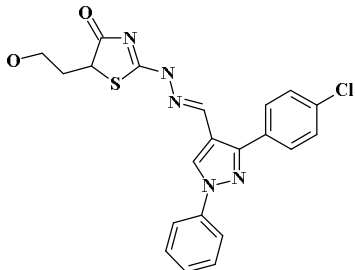
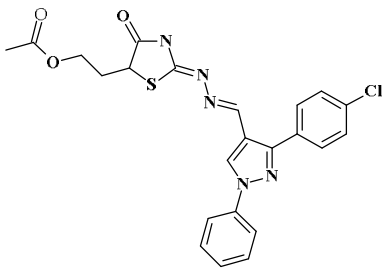
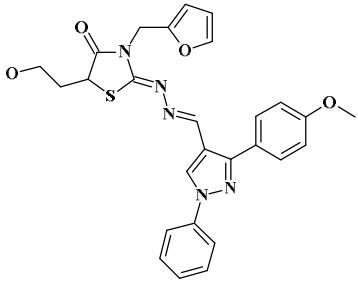
№ п/п	Структура	<i>Tbi gambiense</i> , IC ₅₀ , мкМ	SD
1	2	3	4
III.70		1,5	0,0
III.71		1,0	0,1
III.72		14,7	3,79
III.73		10,5	2,2
III.74		13,2	2,77
III.75		> 1	-
III.76		0,6	0,03

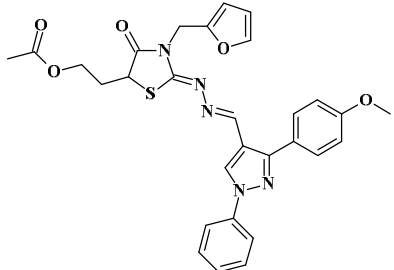
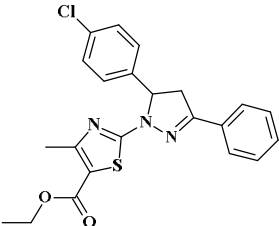
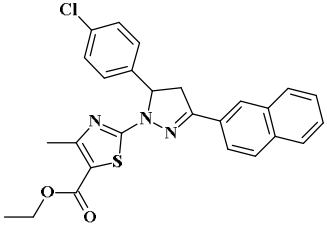
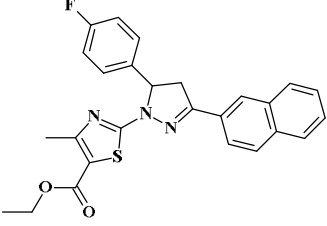
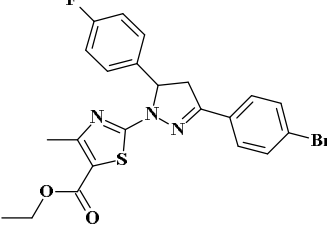
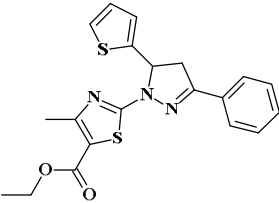
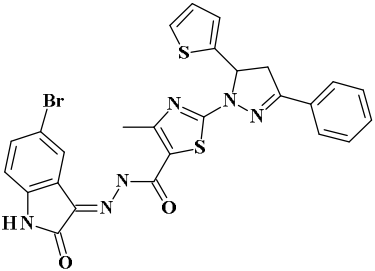
1	2	3	4
III.77		> 98,9	-
III.78		1,5	0,31
III.78		1,5	0,31
III.79		> 20,1	
III.80		2,5	0,81
III.81		21,7	5,74

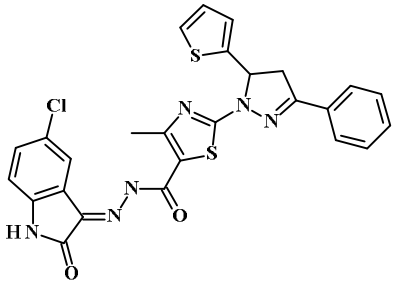
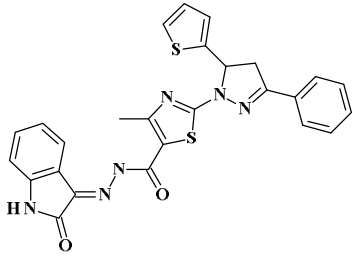
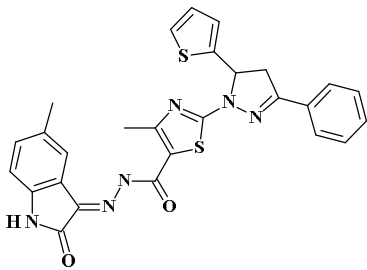
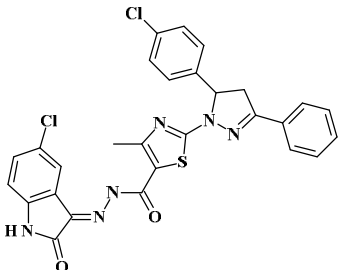
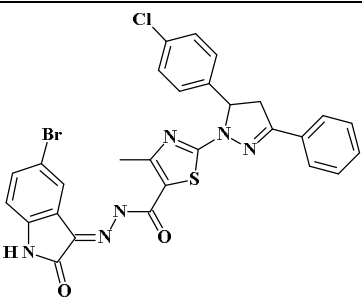
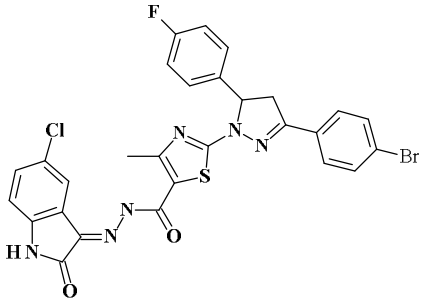
1	2	3	4
III.82		1,2	0,23
III.83		16,5	1,92
III.84		1,1	0,18
III.85		1,2	0,28
III.86		1,9	0,47
III.87		0,7	0,03

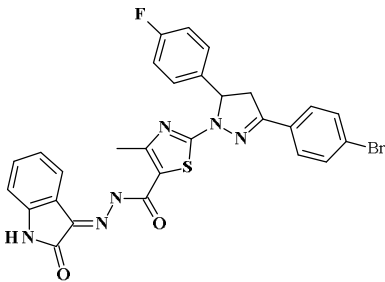
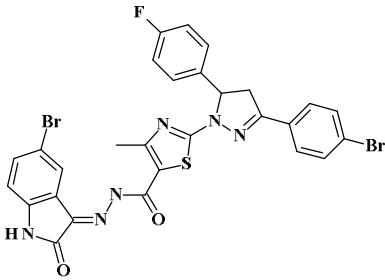
1	2	3	4
III.88		10,8	0,26
III.89		3,5	0,46
III.90		18,6	4,71
III.91		2,1	0,2
III.92		4,6	0,66
III.93		1,5	0,14
III.94		18,39	18,14

1	2	3	4
III.95		>126,30	-
III.96		>106,04	-
III.97		>123,31	-
III.98		>121,98	-
III.99		23,60	3,10
III.100		>117,94	-

1	2	3	4
III.101		>102,97	-
III.102		54,84	11,21
III.103		3,57	0,29
III.104		5,80	0,98
III.105		7,34	0,93
III.106		>96,98	-

1	2	3	4
III.107		>89,66	-
III.108		3,5	0,2
III.109		1,818	0,164
III.110		1,2	0,3
III.111		2,7	0,2
III.112		13,8	1,3
III.113		0,759	0,022

1	2	3	4
III.114		0,989	0,057
III.115		1,8	0,1
III.116		2,0	0,1
III.117		0,365	0,017
III.118		0,289	0,023
III.119		51,3	0,78

1	2	3	4
III.120		6,5	0,1
III.121		1,0	0,04

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори					
	ALogPS logP	ALogPS logS	Se1N2N3ds	SdS	Se1C3C3dd	Se1C3C3da
	1	2	3	4	5	6
III.73	3.61	-4.63	5.08	5.11	0.863	1.76
III.74	4.78	-5.82	4.98	5.09	0.797	1.66
III.75	4.83	-5.76	5.11	5.27	0.959	1.71
III.76	4.29	-5.45	5.17	5.29	0.968	1.72
III.77	4.28	-4.55	5.18	5.5	0.958	1.71
III.79	4.75	-5.38	5.27	5.58	0.956	1.78
III.80	5.39	-5.9	5.15	5.56	0.909	0.0
III.82	5.66	-5.94	5.24	5.59	0.847	1.7
III.83	6.04	-6.13	5.18	5.57	0.838	1.68
III.84	4.72	-5.16	5.01	5.52	0.769	1.63
III.85	4.8	-5.33	5.24	5.57	0.861	1.75
III.86	5.3	-5.85	5.09	5.54	0.822	1.7
III.87	4.66	-5.25	5.04	5.53	0.762	0.0
III.88	4.91	-5.57	5.15	5.55	0.833	0.0
III.89	3.17	-4.52	4.87	5.21	1.05	1.65
III.90	4.44	-5.51	5.1	5.3	1.11	1.71
III.91	4.35	-5.49	5.06	5.15	0.912	1.68
III.92	2.9	-4.83	5.03	5.13	0.919	1.71
III.93	4.07	-5.63	5.02	5.13	0.899	1.65
III.94	3.33	-3.91	0.0	0.0	0.0	0.0
III.95	3.48	-4.19	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	4.63	-4.14	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	3.14	-4.06	0.0	0.0	0.0	0.0
III.98	3.46	-4.32	0.0	0.0	0.0	0.0
III.99	3.32	-4.19	0.0	0.0	0.0	0.0
III.100	3.64	-4.48	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	5.3	-4.25	0.0	0.0	0.0	0.0
III.104	3.6	-4.07	0.0	0.0	0.0	0.0
III.109	6.41	-6.16	5.18	0.0	0.0	2.61
III.110	5.99	-5.97	5.14	0.0	0.0	2.56
III.111	5.48	-5.7	5.03	0.0	0.0	2.55
III.112	4.72	-4.33	5.04	0.0	0.0	2.65
III.113	4.86	-5.07	5.04	0.0	0.53	2.63
III.114	4.94	-5.24	5.03	0.0	0.503	2.58
III.115	4.43	-4.95	5.04	0.0	0.561	2.68

III.116	4.66	-5.04	5.07	0.0	0.601	2.74
III.117	5.36	-5.57	5.09	0.0	0.498	2.57
III.118	5.43	-5.44	5.09	0.0	0.526	2.61
III.119	5.53	-5.84	5.03	0.0	0.485	2.49
III.120	5.04	-5.54	5.04	0.0	0.543	2.59

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C1H1s	SdsCH	Se1C3H1s	SsH	SdsN	Se1C3C3as	Se2C3O1s
	7	8	9	10	11	12	13
III.73	0.761	1.81	-2.05	-2.04	4.82	1.31	9.14
III.74	0.0	1.72	-2.14	-4.85	4.8	1.14	9.06
III.75	-0.476	1.81	-2.11	-3.92	4.9	0.0	9.71
III.76	-0.669	1.82	-2.16	-4.67	4.92	1.25	9.8
III.77	-0.392	1.81	-2.2	-8.41	4.9	1.23	10.3
III.79	0.984	1.86	-2.17	-2.18	4.94	1.32	10.5
III.80	0.19	1.81	-2.17	-4.92	4.9	0.0	10.3
III.82	-0.953	1.78	-2.31	-7.58	4.98	1.19	19.1
III.83	-0.639	1.77	-2.26	-6.79	4.96	0.0	19.0
III.84	-0.757	1.68	-2.38	-3.73	4.8	0.0	18.9
III.85	-0.253	1.79	-2.23	-5.92	4.92	1.28	19.2
III.86	-0.716	1.75	-2.17	-7.0	4.86	0.0	18.9
III.87	-1.08	1.67	-2.43	-5.26	4.82	0.0	19.0
III.88	-0.935	1.77	-2.19	-7.77	4.89	0.0	19.0
III.89	0.0	1.78	-2.18	0.14	4.73	0.958	8.32
III.90	-0.159	1.86	-2.13	-3.5	4.91	1.24	8.51
III.91	-0.447	1.54	-2.23	-8.08	4.73	0.0	20.4
III.92	-0.587	1.54	-2.19	-9.08	4.66	1.2	20.3
III.93	-0.472	1.51	-2.29	-10.1	4.67	0.0	20.4
III.94	-0.173	1.7	0.0	-3.62	8.1	0.0	8.29
III.95	0.0	1.69	0.0	-2.82	8.07	0.0	8.24
III.96	-0.237	1.69	0.0	-6.7	8.68	0.0	9.81
III.97	-0.0271	1.7	-1.53	-3.31	8.22	0.0	8.86
III.98	0.174	1.69	-1.52	-2.51	8.19	0.0	8.8
III.99	0.663	1.71	-1.56	-4.24	8.32	0.0	9.27
III.100	0.861	1.7	-1.55	-3.44	8.29	0.0	9.21
III.102	0.394	1.7	-1.76	-7.32	8.85	0.0	10.8
III.104	0.0	1.66	-1.75	-4.7	8.19	0.0	9.18
III.109	-0.0793	0.0	-2.19	-6.14	4.99	0.0	9.61

III.110	-0.157	0.0	-2.24	-8.16	4.93	0.0	9.59
III.111	-0.038	0.0	-2.16	-8.39	4.85	0.0	9.47
III.112	0.196	0.0	-1.95	-5.23	4.9	0.0	9.42
III.113	-0.887	0.0	-2.09	-3.22	9.1	0.0	19.1
III.114	-0.904	0.0	-2.09	-3.77	9.05	0.0	19.1
III.115	-0.866	0.0	-2.08	-3.36	9.07	0.0	19.1
III.116	-0.879	0.0	-2.09	-3.09	9.12	0.0	19.4
III.117	-0.984	0.0	-2.23	-4.87	9.04	0.0	19.2
III.118	-0.967	0.0	-2.23	-4.32	9.09	0.0	19.2
III.119	-1.05	0.0	-2.3	-6.87	8.98	0.0	19.1
III.120	-1.01	0.0	-2.29	-6.48	9.0	0.0	19.2

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C1N3ss	Se2C3N2ss	SdssC	Se1C2N3ds	SeaC2C3aa	SeaC2C2aa
	14	15	16	17	18	19
III.73	7.04	4.44	1.89	2.99	15.8	19.1
III.74	0.0	4.38	1.59	2.88	23.7	17.7
III.75	2.83	4.48	1.99	3.0	25.3	18.3
III.76	2.85	4.52	2.0	3.03	25.7	18.6
III.77	0.0	4.51	1.86	3.05	21.3	18.1
III.79	7.11	4.57	1.98	3.11	25.5	25.5
III.80	0.0	4.48	1.82	3.02	28.2	18.4
III.82	0.0	4.56	1.15	3.03	33.5	24.2
III.83	0.0	4.52	1.13	3.0	33.1	23.9
III.84	0.0	4.36	0.857	2.87	16.6	26.3
III.85	7.08	4.55	1.15	3.07	23.7	24.9
III.86	0.0	4.43	1.07	2.97	22.0	23.9
III.87	0.0	4.38	0.764	2.88	20.9	20.3
III.88	0.0	4.48	1.08	3.0	22.4	24.3
III.89	0.0	4.27	1.79	2.84	8.94	20.7
III.90	0.0	4.47	1.96	2.99	25.5	18.5
III.91	2.78	4.46	1.37	0.0	25.2	18.3
III.92	2.78	4.42	1.44	0.0	14.6	18.6
III.93	2.77	4.43	1.18	0.0	23.8	17.8
III.94	0.0	3.19	0.359	0.0	15.5	17.7
III.95	0.0	3.17	0.355	0.0	15.1	17.4
III.96	0.0	3.6	0.57	0.0	17.8	23.3
III.97	0.0	3.34	0.362	0.0	15.6	17.7

III.98	0.0	3.32	0.357	0.0	15.2	17.5
III.99	0.0	3.48	0.414	0.0	15.7	17.8
III.100	0.0	3.46	0.41	0.0	15.3	17.6
III.102	0.0	3.84	0.625	0.0	18.1	23.7
III.104	0.0	3.38	0.167	0.0	15.1	17.5
III.109	0.0	4.53	0.644	0.0	25.4	18.5
III.110	0.0	4.49	0.551	0.0	24.1	18.0
III.111	0.0	4.38	0.557	0.0	17.5	11.7
III.112	0.0	4.41	0.752	0.0	7.62	18.5
III.113	0.0	7.71	0.394	0.0	15.4	21.1
III.114	0.0	7.68	0.274	0.0	15.0	21.0
III.115	0.0	7.74	0.447	0.0	11.6	26.8
III.116	0.0	7.86	0.46	0.0	16.5	21.4
III.117	0.0	7.72	0.164	0.0	21.7	21.0
III.118	0.0	7.75	0.285	0.0	22.1	21.1
III.119	0.0	7.65	0.0068	0.0	24.6	14.3
III.120	0.0	7.71	0.18	0.0	21.3	20.0

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SaasC	Se1C3N2ds	Se1C2H1s	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SaaCH	SsCH3
	20	21	22	23	24	25	26
III.73	3.4	4.75	-2.68	1.7	-0.00214	18.6	4.05
III.74	1.64	4.64	-2.92	1.58	-0.0446	20.5	0.0
III.75	2.82	0.0	-2.86	1.65	0.0	22.1	1.69
III.76	2.96	0.0	-2.93	1.66	0.0	22.4	3.35
III.77	4.47	0.0	-5.85	1.65	0.0	21.2	3.29
III.79	5.3	0.0	-2.86	1.72	0.0	26.5	6.09
III.80	5.42	0.0	-2.92	1.64	0.0	23.3	3.66
III.82	3.82	0.0	-3.17	1.62	0.0	28.8	2.98
III.83	3.68	0.0	-3.1	1.61	0.0	28.6	1.34
III.84	2.69	0.0	-3.14	1.52	0.0	23.6	1.32
III.85	4.16	0.0	-2.96	1.68	0.0	25.2	5.36
III.86	3.6	0.0	-2.89	1.63	0.0	24.4	1.33
III.87	3.31	0.0	-3.27	1.49	0.0	21.3	2.92
III.88	3.75	0.0	-2.95	1.63	0.0	24.6	2.97
III.89	2.04	4.58	-2.85	1.55	-0.0449	17.2	0.0
III.90	2.98	4.72	-2.89	1.64	-0.0319	22.4	1.66
III.91	2.53	0.0	-6.32	2.58	0.119	21.5	1.63

III.92	2.71	0.0	-6.09	2.63	0.137	17.5	3.25
III.93	1.36	0.0	-6.45	2.5	0.0993	20.0	1.61
III.94	4.48	2.5	-2.03	0.857	-0.0943	19.7	1.64
III.95	4.32	2.48	-2.0	0.853	-0.0902	19.5	0.0
III.96	5.22	0.0	-5.24	1.04	0.0	25.2	1.64
III.97	4.47	2.59	0.0	0.0	-0.0975	19.7	3.46
III.98	4.32	2.57	0.0	0.0	-0.0933	19.5	1.82
III.99	4.48	2.69	-1.54	0.0	-0.0791	19.8	3.61
III.100	4.33	2.67	-1.52	0.0	-0.075	19.5	1.97
III.102	5.23	0.0	-4.79	0.0	0.0	25.3	3.65
III.104	4.2	2.6	-4.58	0.0	-0.141	19.4	0.0
III.109	4.79	0.0	-5.0	1.64	0.0	22.2	3.64
III.110	3.48	0.0	-5.1	1.6	0.0	20.7	3.59
III.111	4.49	0.0	-4.85	1.61	0.0	14.4	3.58
III.112	4.52	0.0	-4.47	1.69	0.0	16.6	3.67
III.113	6.2	4.46	-2.78	1.63	-0.579	21.8	1.8
III.114	5.66	4.42	-2.79	1.63	-0.612	21.4	1.79
III.115	5.46	4.5	-2.77	1.63	-0.542	23.7	1.81
III.116	6.49	4.61	-2.78	1.64	-0.534	22.1	3.75
III.117	5.93	4.43	-2.97	1.6	-0.637	22.7	1.77
III.118	6.47	4.47	-2.96	1.61	-0.604	23.1	1.78
III.119	5.47	4.4	-3.08	1.54	-0.666	19.1	1.74
III.120	5.31	4.48	-3.07	1.55	-0.596	21.4	1.75

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SsssN	SsssCH	SssNH	Se1C2C3ss	SssCH2	Se1C2H1a	Se1C3N3as
	27	28	29	30	31	32	33
III.73	3.97	0.0292	2.66	1.11	0.77	-2.78	2.66
III.74	1.78	-0.145	2.63	0.974	0.632	-5.13	0.0
III.75	3.37	-0.0366	0.0	1.04	0.714	-4.37	0.0
III.76	3.38	-0.0333	0.0	1.05	0.718	-4.68	0.0
III.77	3.45	-0.071	0.0	1.03	1.05	-4.96	0.0
III.79	5.61	-0.00989	0.0	1.1	0.75	-4.81	4.68
III.80	3.44	-0.0766	0.0	1.03	0.683	-5.45	1.96
III.82	3.33	-0.125	0.0	0.981	0.654	-8.25	1.84
III.83	3.32	-0.128	0.0	0.98	0.65	-7.91	1.83
III.84	3.13	-0.294	0.0	0.839	0.558	-6.55	1.75
III.85	5.39	-0.072	0.0	1.06	0.701	-6.05	4.49

III.86	3.27	-0.103	0.0	1.01	0.673	-5.97	1.78
III.87	3.11	-0.33	0.0	0.811	0.519	-7.21	1.75
III.88	3.29	-0.0749	0.0	1.02	0.678	-6.3	1.79
III.89	1.78	-0.169	2.61	0.905	0.643	-3.19	0.0
III.90	1.91	-0.00898	2.67	1.04	0.732	-4.63	0.0
III.91	2.93	-0.261	2.96	0.968	0.56	-4.77	0.0
III.92	2.93	-0.223	2.95	1.01	0.614	-3.39	0.0
III.93	2.83	-0.369	2.92	0.914	0.433	-5.54	0.0
III.94	0.0	0.0	2.82	0.0	0.352	-4.27	0.0
III.95	0.0	0.0	2.81	0.0	0.351	-3.95	0.0
III.96	1.62	0.0	0.0	0.0	0.739	-5.56	0.0
III.97	0.0	-0.173	2.85	0.0	0.0	-4.32	0.0
III.98	0.0	-0.174	2.84	0.0	0.0	-4.0	0.0
III.99	0.0	-0.122	2.88	1.21	0.747	-4.32	0.0
III.100	0.0	-0.123	2.87	1.21	0.746	-4.0	0.0
III.102	1.67	-0.158	0.0	1.24	1.11	-5.64	0.0
III.104	0.0	-0.359	2.82	0.922	0.317	-4.19	0.0
III.109	1.94	-0.0457	0.0	1.02	1.05	-4.58	2.15
III.110	1.86	-0.154	0.0	0.969	0.944	-5.35	2.11
III.111	1.85	-0.134	0.0	0.991	0.962	-3.8	2.09
III.112	1.99	0.123	0.0	1.11	1.19	-1.67	2.14
III.113	1.95	0.0331	5.32	1.03	0.761	-3.79	2.07
III.114	1.94	0.025	5.25	1.03	0.754	-4.0	2.06
III.115	1.95	0.0391	5.31	1.04	0.766	-3.94	2.07
III.116	1.95	0.0375	5.35	1.04	0.765	-3.67	2.09
III.117	1.88	-0.109	5.24	0.976	0.672	-5.37	2.06
III.118	1.89	-0.101	5.3	0.98	0.679	-5.15	2.06
III.119	1.8	-0.232	5.2	0.906	0.577	-6.22	2.01
III.120	1.81	-0.218	5.25	0.915	0.588	-6.18	2.02

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3S2ds	SsF	SaaaC	SeaC3C3aa	Se1C3N3ds	SsCl	Se1C3C3sa
	34	35	36	37	38	39	40
III.73	2.94	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	2.81	13.5	3.11	2.29	0.0	0.0	0.0
III.75	3.13	0.0	3.18	2.32	3.4	6.1	1.24
III.76	3.15	0.0	3.19	2.33	3.43	0.0	0.0
III.77	3.16	0.0	0.0	0.0	3.54	0.0	0.0

III.79	3.17	0.0	0.0	0.0	3.4	0.0	0.0
III.80	3.08	0.0	0.0	0.0	3.32	6.13	1.22
III.82	2.98	0.0	3.14	2.32	3.17	0.0	0.0
III.83	2.95	0.0	3.13	2.31	3.14	6.17	1.18
III.84	2.83	0.0	0.0	1.17	3.01	0.0	0.906
III.85	3.0	0.0	0.0	0.0	3.16	0.0	0.0
III.86	2.92	0.0	0.0	0.0	3.08	6.12	1.2
III.87	2.82	0.0	0.0	1.16	3.01	0.0	0.887
III.88	2.94	0.0	0.0	0.0	3.11	0.0	1.24
III.89	2.48	0.0	0.0	1.19	0.0	0.0	0.0
III.90	2.6	0.0	3.19	2.32	0.0	0.0	0.0
III.91	3.02	0.0	3.08	2.31	5.18	6.09	1.17
III.92	3.03	0.0	0.0	0.0	5.2	0.0	0.0
III.93	3.0	13.6	3.02	2.3	5.12	0.0	1.09
III.94	1.46	0.0	0.0	1.31	0.0	0.0	0.0
III.95	1.45	0.0	0.0	1.29	0.0	6.01	0.0
III.96	1.63	0.0	0.0	1.31	3.69	0.0	0.0
III.97	1.54	0.0	0.0	1.32	0.0	0.0	0.0
III.98	1.53	0.0	0.0	1.31	0.0	6.02	0.0
III.99	1.64	0.0	0.0	1.35	0.0	0.0	0.0
III.100	1.63	0.0	0.0	1.33	0.0	6.03	0.0
III.102	1.81	0.0	0.0	1.35	4.07	0.0	0.0
III.104	1.52	0.0	0.0	1.3	0.0	6.03	0.0
III.109	0.0	0.0	3.19	3.64	0.0	6.14	1.22
III.110	0.0	13.6	3.13	3.61	0.0	0.0	1.15
III.111	0.0	13.5	0.0	1.29	0.0	0.0	1.15
III.112	0.0	0.0	0.0	1.32	0.0	0.0	1.32
III.113	0.0	0.0	0.0	2.33	0.0	0.0	1.24
III.114	0.0	0.0	0.0	2.28	0.0	6.08	1.24
III.115	0.0	0.0	0.0	2.38	0.0	0.0	1.25
III.116	0.0	0.0	0.0	2.45	0.0	0.0	1.25
III.117	0.0	0.0	0.0	2.26	0.0	12.2	1.17
III.118	0.0	0.0	0.0	2.31	0.0	6.14	1.17
III.119	0.0	13.7	0.0	2.22	0.0	6.08	1.08
III.120	0.0	13.7	0.0	2.33	0.0	0.0	1.09

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори					
	SssO	Se1C3O2as	Se1C1O2ss	Se1C2N3ss	Se1C1C3sa	Se1C3C3ad

	41	42	43	44	45	46
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	5.31	4.75	5.32	0.0	0.0	0.0
III.77	10.6	9.46	10.6	1.92	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0	2.73	0.0
III.80	5.29	4.69	5.27	0.0	2.71	1.7
III.82	10.5	9.07	5.36	0.0	0.0	0.0
III.83	5.1	4.26	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	5.16	4.29	0.0	0.0	0.0	0.0
III.85	5.19	4.35	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	5.17	4.3	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	10.4	8.96	5.25	0.0	0.0	1.6
III.88	10.5	9.01	5.28	0.0	0.0	1.7
III.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.90	5.3	4.72	5.29	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.92	5.25	4.73	5.3	0.0	0.0	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.94	5.24	4.56	5.16	0.0	0.0	0.0
III.95	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	5.28	4.61	5.22	1.95	0.0	0.0
III.97	5.25	4.58	5.18	0.0	0.0	0.0
III.98	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.99	5.26	4.6	5.2	0.0	0.0	0.0
III.100	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	5.3	4.65	5.26	2.07	0.0	0.0
III.104	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.109	5.21	0.0	0.0	0.0	2.41	0.0
III.110	5.19	0.0	0.0	0.0	2.39	0.0
III.111	5.16	0.0	0.0	0.0	2.37	0.0
III.112	5.17	0.0	0.0	0.0	2.4	0.0
III.113	0.0	0.0	0.0	0.0	2.31	0.729
III.114	0.0	0.0	0.0	0.0	2.3	0.719
III.115	0.0	0.0	0.0	0.0	2.32	0.742
III.116	0.0	0.0	0.0	0.0	4.95	0.76
III.117	0.0	0.0	0.0	0.0	2.3	0.71
III.118	0.0	0.0	0.0	0.0	2.31	0.721
III.119	0.0	0.0	0.0	0.0	2.27	0.684
III.120	0.0	0.0	0.0	0.0	2.29	0.708

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3O2ds	Se1C1C3sd	Se1H1O1s	Se1C3O1as	Se1C2N2ss	Se1N2N2ds
	47	48	49	50	51	52
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.77	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.80	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.82	3.79	1.68	0.0	0.0	0.0	0.0
III.83	3.77	1.67	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	3.78	1.65	4.64	8.8	0.0	0.0
III.85	3.84	1.68	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	3.79	1.66	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	3.79	1.65	4.66	8.85	0.0	0.0
III.88	3.81	1.67	0.0	0.0	0.0	0.0
III.89	0.0	0.0	4.52	8.56	0.0	0.0
III.90	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0	3.08	0.0
III.92	0.0	0.0	0.0	0.0	3.09	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0	3.06	0.0
III.94	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.87
III.95	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.82
III.96	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.99
III.98	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.99	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.100	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.104	0.0	0.0	4.4	0.0	0.0	0.0
III.109	4.23	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.110	4.21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.111	4.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.112	4.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.113	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.114	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.115	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.116	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

III.117	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.118	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.119	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.120	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3N2dd	Se1C2S2ss	Se1C3S2ss	Se1N2N2sd	Se1C3C3sd	Se1C1C2ss
	53	54	55	56	57	58
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.77	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.80	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.82	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.83	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.85	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.88	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.90	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.92	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.94	2.88	1.55	0.0	0.0	0.0	0.0
III.95	2.86	1.54	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	0.0	1.68	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	3.07	0.0	1.3	0.0	0.0	0.0
III.98	3.05	0.0	1.3	4.94	0.577	0.0
III.99	3.24	0.0	1.45	5.1	0.708	2.83
III.100	3.22	0.0	1.44	5.05	0.705	2.82
III.102	0.0	0.0	1.54	0.0	0.848	2.91
III.104	3.13	0.0	1.27	5.01	0.532	0.0
III.109	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.45
III.110	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.44

III.111	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.43
III.112	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.45
III.113	0.0	0.0	0.0	4.84	0.0	0.0
III.114	0.0	0.0	0.0	4.82	0.0	0.0
III.115	0.0	0.0	0.0	4.86	0.0	0.0
III.116	0.0	0.0	0.0	4.95	0.0	0.0
III.117	0.0	0.0	0.0	4.84	0.0	0.0
III.118	0.0	0.0	0.0	4.86	0.0	0.0
III.119	0.0	0.0	0.0	4.82	0.0	0.0
III.120	0.0	0.0	0.0	4.86	0.0	0.0

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори			
	SeaC3S2aa	Se1C2O2ss	SsBr	SeaC2S2aa
	59	60	61	62
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	0.0	0.0	0.0	0.0
III.77	0.0	0.0	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0
III.80	0.0	0.0	0.0	0.0
III.82	0.0	0.0	0.0	0.0
III.83	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	0.0	0.0	0.0	0.0
III.85	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	0.0	0.0	0.0	0.0
III.88	0.0	0.0	0.0	0.0
III.89	0.0	0.0	0.0	0.0
III.90	0.0	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0
III.92	0.0	0.0	0.0	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0
III.94	0.0	0.0	0.0	0.0
III.95	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	0.0	0.0	0.0	0.0
III.98	0.0	0.0	0.0	0.0

III.99	0.0	0.0	0.0	0.0
III.100	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	0.0	0.0	0.0	0.0
III.104	0.0	0.0	0.0	0.0
III.109	2.45	4.6	0.0	0.0
III.110	2.4	4.59	0.0	0.0
III.111	2.39	4.55	3.46	0.0
III.112	4.27	4.56	0.0	2.36
III.113	3.95	0.0	3.41	2.32
III.114	3.93	0.0	0.0	2.32
III.115	3.97	0.0	0.0	2.33
III.116	4.0	0.0	0.0	2.34
III.117	2.18	0.0	0.0	0.0
III.118	2.19	0.0	3.41	0.0
III.119	2.11	0.0	3.46	0.0
III.120	2.14	0.0	3.47	0.0

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори					
	ALogPS logP	ALogPS logS	Se1N2N3ds	SdS	Se1C3C3dd	Se1C3C3da
	1	2	3	4	5	6
III.72	3.57	-5.0	4.99	5.09	0.833	1.73
III.78	4.78	-5.68	5.18	5.56	0.926	1.75
III.81	6.11	-6.25	5.21	5.59	0.913	1.71
III.101	4.99	-4.19	0.0	0.0	0.0	0.0
III.103	3.42	-4.25	0.0	0.0	0.0	0.0
III.105	4.81	-4.56	0.0	0.0	0.0	0.0
III.106	4.51	-3.95	0.0	0.0	0.0	0.0
III.107	4.91	-4.23	0.0	0.0	0.0	0.0
III.108	5.32	-5.53	5.09	0.0	0.0	2.63
III.121	5.42	-5.93	5.04	0.0	0.512	2.54

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C1H1s	SdsCH	Se1C3H1s	SsH	SdsN	Se1C3C3as	Se2C3O1s

	7	8	9	10	11	12	13
III.72	-0.0985	1.78	-2.04	-3.93	4.79	1.25	9.03
III.78	0.198	1.83	-2.17	-4.14	4.91	1.25	10.4
III.81	0.347	1.83	-2.21	-3.17	4.98	0.0	10.4
III.101	-0.341	1.69	-1.73	-6.3	8.77	0.0	10.4
III.103	-0.535	1.67	-1.83	-10.1	8.3	0.0	18.2
III.105	-0.282	1.62	-1.8	-9.42	8.34	0.0	18.4
III.106	-0.284	1.66	-1.97	-8.6	8.76	0.0	10.7
III.107	-0.719	1.65	-2.03	-13.6	8.82	0.0	20.0
III.108	0.0679	0.0	-2.09	-6.34	4.9	0.0	9.49
III.121	-1.03	0.0	-2.3	-6.32	9.02	0.0	19.2

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C1N3ss	Se2C3N2ss	SdssC	Se1C2N3ds	SeaC2C3aa	SeaC2C2aa
	14	15	16	17	18	19
III.72	0.0	4.37	1.83	2.93	14.6	18.5
III.78	0.0	4.5	1.93	3.05	24.3	24.9
III.81	0.0	4.54	1.87	3.04	34.9	24.6
III.101	0.0	3.73	0.572	0.0	17.9	23.5
III.103	0.0	3.48	-0.233	0.0	15.6	17.8
III.105	0.0	3.41	-0.143	0.0	15.1	17.5
III.106	0.0	3.78	0.382	0.0	17.9	23.5
III.107	0.0	3.85	-0.0298	0.0	18.0	23.6
III.108	0.0	4.44	0.672	0.0	14.4	18.5
III.121	0.0	7.68	0.127	0.0	25.1	14.3

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори						
	SaasC	Se1C3N2ds	Se1C2H1s	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SaaCH	SsCH3
	20	21	22	23	24	25	26
III.72	2.99	4.68	-2.68	1.66	-0.0128	18.0	1.65
III.78	4.88	0.0	-2.86	1.67	0.0	25.9	3.67
III.81	4.69	0.0	-3.02	1.64	0.0	30.0	2.02
III.101	5.21	0.0	-2.95	0.0	0.0	25.2	3.52

III.103	4.29	2.67	-4.63	0.0	-0.151	19.5	2.96
III.105	4.1	5.27	-4.58	0.0	-0.0708	19.3	1.34
III.106	5.04	0.0	-8.25	0.0	0.0	25.0	1.63
III.107	4.96	0.0	-8.32	0.0	0.0	24.9	2.98
III.108	4.86	0.0	-4.71	1.67	0.0	17.9	3.64
III.121	6.01	4.43	-3.07	1.55	-0.633	19.6	1.75

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори						
	SsssN	SsssCH	SssNH	Se1C2C3ss	SssCH2	Se1C2H1a	Se1C3N3as
	27	28	29	30	31	32	33
III.72	1.86	0.0011	2.65	1.07	0.747	-3.01	0.0
III.78	3.48	-0.038	0.0	1.05	0.727	-5.06	1.97
III.81	3.48	-0.076	0.0	1.02	0.692	-6.49	1.96
III.101	1.64	-0.209	0.0	0.0	0.38	-5.64	0.0
III.103	0.0	-0.391	2.84	0.988	0.577	-4.59	0.0
III.105	0.0	-0.367	2.7	1.01	0.593	-4.29	0.0
III.106	1.58	-0.394	0.0	0.952	0.587	-5.95	0.0
III.107	1.58	-0.427	0.0	1.02	0.82	-6.07	0.0
III.108	1.93	-0.011	0.0	1.06	1.09	-2.92	2.14
III.121	1.81	-0.224	5.26	0.91	0.583	-6.0	2.01

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3S2ds	SsF	SaaaC	SeaC3C3aa	Se1C3N3ds	SsCl	Se1C3C3sa
	34	35	36	37	38	39	40
III.72	2.88	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	3.11	0.0	0.0	0.0	3.35	0.0	0.0
III.81	3.09	0.0	3.18	2.33	3.33	6.17	1.22
III.101	1.71	0.0	0.0	1.33	3.86	0.0	0.0
III.103	1.58	0.0	0.0	1.32	0.0	0.0	0.0
III.105	1.57	0.0	0.0	1.28	0.0	6.04	0.0
III.106	1.71	0.0	0.0	1.32	3.87	0.0	0.0
III.107	1.75	0.0	0.0	1.33	3.96	0.0	0.0
III.108	0.0	0.0	0.0	1.32	0.0	6.08	1.24

III.121	0.0	13.7	0.0	2.27	0.0	0.0	1.08
----------------	-----	------	-----	------	-----	-----	------

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори					
	SssO	Se1C3O2as	Se1C1O2ss	Se1C2N3ss	Se1C1C3sa	Se1C3C3ad
	41	42	43	44	45	46
III.72	5.26	4.68	5.25	0.0	0.0	0.0
III.78	5.32	4.76	5.33	0.0	2.72	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0	2.71	0.0
III.101	5.29	4.63	5.24	2.0	0.0	0.0
III.103	10.2	4.61	5.21	0.0	0.0	0.0
III.105	4.91	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.106	5.29	4.64	5.25	1.99	0.0	0.0
III.107	10.4	4.66	5.27	2.02	0.0	0.0
III.108	5.18	0.0	0.0	0.0	2.4	0.0
III.121	0.0	0.0	0.0	0.0	2.28	0.695

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель ASNN)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3O2ds	Se1C1C3sd	Se1H1O1s	Se1C3O1as	Se1C2N2ss	Se1N2N2ds
	47	48	49	50	51	52
III.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.101	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.103	4.07	1.83	0.0	0.0	0.0	5.13
III.105	4.07	1.83	0.0	0.0	0.0	0.0
III.106	0.0	0.0	4.63	0.0	0.0	0.0
III.107	4.22	1.87	0.0	0.0	0.0	0.0
III.108	4.19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.121	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3N2dd	Se1C2S2ss	Se1C3S2ss	Se1N2N2sd	Se1C3C3sd	Se1C1C2ss
	53	54	55	56	57	58
III.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.101	0.0	0.0	1.4	0.0	0.72	0.0
III.103	3.25	0.0	1.32	0.0	0.0	0.0
III.105	0.0	0.0	1.35	0.0	0.648	0.0
III.106	0.0	0.0	1.37	0.0	0.676	0.0
III.107	0.0	0.0	1.42	0.0	0.713	0.0
III.108	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.45
III.121	0.0	0.0	0.0	4.84	0.0	0.0

Продовж. дод. А.9

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *ASNN*)**

№ п/п	Дескриптори			
	SeaC3S2aa	Se1C2O2ss	SsBr	SeaC2S2aa
	59	60	61	62
III.72	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	0.0	0.0	0.0	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0
III.101	0.0	0.0	0.0	0.0
III.103	0.0	4.7	0.0	0.0
III.105	0.0	4.7	0.0	0.0
III.106	0.0	0.0	0.0	0.0
III.107	0.0	4.88	0.0	0.0
III.108	2.46	4.57	0.0	0.0
III.121	2.12	0.0	6.87	0.0

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	ALogPS_logP	ALogPS_logS	Se1N2N3ds	SdS	Se1C3C3dd	Se1C3C3da
	1	2	3	4	5	6
III.73	3.61	-4.63	5.08	5.11	0.863	1.76
III.74	4.78	-5.82	4.98	5.09	0.797	1.66
III.75	4.83	-5.76	5.11	5.27	0.959	1.71
III.76	4.29	-5.45	5.17	5.29	0.968	1.72
III.77	4.28	-4.55	5.18	5.5	0.958	1.71
III.79	4.75	-5.38	5.27	5.58	0.956	1.78
III.80	5.39	-5.9	5.15	5.56	0.909	0.0
III.82	5.66	-5.94	5.24	5.59	0.847	1.7
III.83	6.04	-6.13	5.18	5.57	0.838	1.68
III.84	4.72	-5.16	5.01	5.52	0.769	1.63
III.85	4.8	-5.33	5.24	5.57	0.861	1.75
III.86	5.3	-5.85	5.09	5.54	0.822	1.7
III.87	4.66	-5.25	5.04	5.53	0.762	0.0
III.88	4.91	-5.57	5.15	5.55	0.833	0.0
III.89	3.17	-4.52	4.87	5.21	1.05	1.65
III.90	4.44	-5.51	5.1	5.3	1.11	1.71
III.91	4.35	-5.49	5.06	5.15	0.912	1.68
III.92	2.9	-4.83	5.03	5.13	0.919	1.71
III.93	4.07	-5.63	5.02	5.13	0.899	1.65
III.94	3.33	-3.91	0.0	0.0	0.0	0.0
III.95	3.48	-4.19	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	4.63	-4.14	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	3.14	-4.06	0.0	0.0	0.0	0.0
III.98	3.46	-4.32	0.0	0.0	0.0	0.0
III.99	3.32	-4.19	0.0	0.0	0.0	0.0
III.100	3.64	-4.48	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	5.3	-4.25	0.0	0.0	0.0	0.0
III.104	3.6	-4.07	0.0	0.0	0.0	0.0
III.109	6.41	-6.16	5.18	0.0	0.0	2.61
III.110	5.99	-5.97	5.14	0.0	0.0	2.56
III.111	5.48	-5.7	5.03	0.0	0.0	2.55
III.112	4.72	-4.33	5.04	0.0	0.0	2.65
III.113	4.86	-5.07	5.04	0.0	0.53	2.63
III.114	4.94	-5.24	5.03	0.0	0.503	2.58
III.115	4.43	-4.95	5.04	0.0	0.561	2.68
III.116	4.66	-5.04	5.07	0.0	0.601	2.74

III.117	5.36	-5.57	5.09	0.0	0.498	2.57
III.118	5.43	-5.44	5.09	0.0	0.526	2.61
III.119	5.53	-5.84	5.03	0.0	0.485	2.49
III.120	5.04	-5.54	5.04	0.0	0.543	2.59

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C1H1s	SdsCH	Se1C3H1s	SsH	SdsN	Se1C3C3as	Se2C3O1s
	7	8	9	10	11	12	13
III.73	0.761	1.81	-2.05	-2.04	4.82	1.31	9.14
III.74	0.0	1.72	-2.14	-4.85	4.8	1.14	9.06
III.75	-0.476	1.81	-2.11	-3.92	4.9	0.0	9.71
III.76	-0.669	1.82	-2.16	-4.67	4.92	1.25	9.8
III.77	-0.392	1.81	-2.2	-8.41	4.9	1.23	10.3
III.79	0.984	1.86	-2.17	-2.18	4.94	1.32	10.5
III.80	0.19	1.81	-2.17	-4.92	4.9	0.0	10.3
III.82	-0.953	1.78	-2.31	-7.58	4.98	1.19	19.1
III.83	-0.639	1.77	-2.26	-6.79	4.96	0.0	19.0
III.84	-0.757	1.68	-2.38	-3.73	4.8	0.0	18.9
III.85	-0.253	1.79	-2.23	-5.92	4.92	1.28	19.2
III.86	-0.716	1.75	-2.17	-7.0	4.86	0.0	18.9
III.87	-1.08	1.67	-2.43	-5.26	4.82	0.0	19.0
III.88	-0.935	1.77	-2.19	-7.77	4.89	0.0	19.0
III.89	0.0	1.78	-2.18	0.14	4.73	0.958	8.32
III.90	-0.159	1.86	-2.13	-3.5	4.91	1.24	8.51
III.91	-0.447	1.54	-2.23	-8.08	4.73	0.0	20.4
III.92	-0.587	1.54	-2.19	-9.08	4.66	1.2	20.3
III.93	-0.472	1.51	-2.29	-10.1	4.67	0.0	20.4
III.94	-0.173	1.7	0.0	-3.62	8.1	0.0	8.29
III.95	0.0	1.69	0.0	-2.82	8.07	0.0	8.24
III.96	-0.237	1.69	0.0	-6.7	8.68	0.0	9.81
III.97	-0.0271	1.7	-1.53	-3.31	8.22	0.0	8.86
III.98	0.174	1.69	-1.52	-2.51	8.19	0.0	8.8
III.99	0.663	1.71	-1.56	-4.24	8.32	0.0	9.27
III.100	0.861	1.7	-1.55	-3.44	8.29	0.0	9.21
III.102	0.394	1.7	-1.76	-7.32	8.85	0.0	10.8
III.104	0.0	1.66	-1.75	-4.7	8.19	0.0	9.18
III.109	-0.0793	0.0	-2.19	-6.14	4.99	0.0	9.61
III.110	-0.157	0.0	-2.24	-8.16	4.93	0.0	9.59

III.111	-0.038	0.0	-2.16	-8.39	4.85	0.0	9.47
III.112	0.196	0.0	-1.95	-5.23	4.9	0.0	9.42
III.113	-0.887	0.0	-2.09	-3.22	9.1	0.0	19.1
III.114	-0.904	0.0	-2.09	-3.77	9.05	0.0	19.1
III.115	-0.866	0.0	-2.08	-3.36	9.07	0.0	19.1
III.116	-0.879	0.0	-2.09	-3.09	9.12	0.0	19.4
III.117	-0.984	0.0	-2.23	-4.87	9.04	0.0	19.2
III.118	-0.967	0.0	-2.23	-4.32	9.09	0.0	19.2
III.119	-1.05	0.0	-2.3	-6.87	8.98	0.0	19.1
III.120	-1.01	0.0	-2.29	-6.48	9.0	0.0	19.2

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C1N3ss	Se2C3N2ss	SdssC	Se1C2N3ds	SeaC2C3aa	SeaC2C2aa
	14	15	16	17	18	19
III.73	7.04	4.44	1.89	2.99	15.8	19.1
III.74	0.0	4.38	1.59	2.88	23.7	17.7
III.75	2.83	4.48	1.99	3.0	25.3	18.3
III.76	2.85	4.52	2.0	3.03	25.7	18.6
III.77	0.0	4.51	1.86	3.05	21.3	18.1
III.79	7.11	4.57	1.98	3.11	25.5	25.5
III.80	0.0	4.48	1.82	3.02	28.2	18.4
III.82	0.0	4.56	1.15	3.03	33.5	24.2
III.83	0.0	4.52	1.13	3.0	33.1	23.9
III.84	0.0	4.36	0.857	2.87	16.6	26.3
III.85	7.08	4.55	1.15	3.07	23.7	24.9
III.86	0.0	4.43	1.07	2.97	22.0	23.9
III.87	0.0	4.38	0.764	2.88	20.9	20.3
III.88	0.0	4.48	1.08	3.0	22.4	24.3
III.89	0.0	4.27	1.79	2.84	8.94	20.7
III.90	0.0	4.47	1.96	2.99	25.5	18.5
III.91	2.78	4.46	1.37	0.0	25.2	18.3
III.92	2.78	4.42	1.44	0.0	14.6	18.6
III.93	2.77	4.43	1.18	0.0	23.8	17.8
III.94	0.0	3.19	0.359	0.0	15.5	17.7
III.95	0.0	3.17	0.355	0.0	15.1	17.4
III.96	0.0	3.6	0.57	0.0	17.8	23.3
III.97	0.0	3.34	0.362	0.0	15.6	17.7
III.98	0.0	3.32	0.357	0.0	15.2	17.5

III.99	0.0	3.48	0.414	0.0	15.7	17.8
III.100	0.0	3.46	0.41	0.0	15.3	17.6
III.102	0.0	3.84	0.625	0.0	18.1	23.7
III.104	0.0	3.38	0.167	0.0	15.1	17.5
III.109	0.0	4.53	0.644	0.0	25.4	18.5
III.110	0.0	4.49	0.551	0.0	24.1	18.0
III.111	0.0	4.38	0.557	0.0	17.5	11.7
III.112	0.0	4.41	0.752	0.0	7.62	18.5
III.113	0.0	7.71	0.394	0.0	15.4	21.1
III.114	0.0	7.68	0.274	0.0	15.0	21.0
III.115	0.0	7.74	0.447	0.0	11.6	26.8
III.116	0.0	7.86	0.46	0.0	16.5	21.4
III.117	0.0	7.72	0.164	0.0	21.7	21.0
III.118	0.0	7.75	0.285	0.0	22.1	21.1
III.119	0.0	7.65	0.0068	0.0	24.6	14.3
III.120	0.0	7.71	0.18	0.0	21.3	20.0

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SaaS	Se1C3N2ds	Se1C2H1s	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SaaCH	SsCH3
	20	21	22	23	24	25	26
III.73	3.4	4.75	-2.68	1.7	-0.00214	18.6	4.05
III.74	1.64	4.64	-2.92	1.58	-0.0446	20.5	0.0
III.75	2.82	0.0	-2.86	1.65	0.0	22.1	1.69
III.76	2.96	0.0	-2.93	1.66	0.0	22.4	3.35
III.77	4.47	0.0	-5.85	1.65	0.0	21.2	3.29
III.79	5.3	0.0	-2.86	1.72	0.0	26.5	6.09
III.80	5.42	0.0	-2.92	1.64	0.0	23.3	3.66
III.82	3.82	0.0	-3.17	1.62	0.0	28.8	2.98
III.83	3.68	0.0	-3.1	1.61	0.0	28.6	1.34
III.84	2.69	0.0	-3.14	1.52	0.0	23.6	1.32
III.85	4.16	0.0	-2.96	1.68	0.0	25.2	5.36
III.86	3.6	0.0	-2.89	1.63	0.0	24.4	1.33
III.87	3.31	0.0	-3.27	1.49	0.0	21.3	2.92
III.88	3.75	0.0	-2.95	1.63	0.0	24.6	2.97
III.89	2.04	4.58	-2.85	1.55	-0.0449	17.2	0.0
III.90	2.98	4.72	-2.89	1.64	-0.0319	22.4	1.66
III.91	2.53	0.0	-6.32	2.58	0.119	21.5	1.63
III.92	2.71	0.0	-6.09	2.63	0.137	17.5	3.25

III.93	1.36	0.0	-6.45	2.5	0.0993	20.0	1.61
III.94	4.48	2.5	-2.03	0.857	-0.0943	19.7	1.64
III.95	4.32	2.48	-2.0	0.853	-0.0902	19.5	0.0
III.96	5.22	0.0	-5.24	1.04	0.0	25.2	1.64
III.97	4.47	2.59	0.0	0.0	-0.0975	19.7	3.46
III.98	4.32	2.57	0.0	0.0	-0.0933	19.5	1.82
III.99	4.48	2.69	-1.54	0.0	-0.0791	19.8	3.61
III.100	4.33	2.67	-1.52	0.0	-0.075	19.5	1.97
III.102	5.23	0.0	-4.79	0.0	0.0	25.3	3.65
III.104	4.2	2.6	-4.58	0.0	-0.141	19.4	0.0
III.109	4.79	0.0	-5.0	1.64	0.0	22.2	3.64
III.110	3.48	0.0	-5.1	1.6	0.0	20.7	3.59
III.111	4.49	0.0	-4.85	1.61	0.0	14.4	3.58
III.112	4.52	0.0	-4.47	1.69	0.0	16.6	3.67
III.113	6.2	4.46	-2.78	1.63	-0.579	21.8	1.8
III.114	5.66	4.42	-2.79	1.63	-0.612	21.4	1.79
III.115	5.46	4.5	-2.77	1.63	-0.542	23.7	1.81
III.116	6.49	4.61	-2.78	1.64	-0.534	22.1	3.75
III.117	5.93	4.43	-2.97	1.6	-0.637	22.7	1.77
III.118	6.47	4.47	-2.96	1.61	-0.604	23.1	1.78
III.119	5.47	4.4	-3.08	1.54	-0.666	19.1	1.74
III.120	5.31	4.48	-3.07	1.55	-0.596	21.4	1.75

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SsssN	SsssCH	SssNH	Se1C2C3ss	SssCH2	Se1C2H1a	Se1C3N3as
	27	28	29	30	21	32	33
III.73	3.97	0.0292	2.66	1.11	0.77	-2.78	2.66
III.74	1.78	-0.145	2.63	0.974	0.632	-5.13	0.0
III.75	3.37	-0.0366	0.0	1.04	0.714	-4.37	0.0
III.76	3.38	-0.0333	0.0	1.05	0.718	-4.68	0.0
III.77	3.45	-0.071	0.0	1.03	1.05	-4.96	0.0
III.79	5.61	-0.00989	0.0	1.1	0.75	-4.81	4.68
III.80	3.44	-0.0766	0.0	1.03	0.683	-5.45	1.96
III.82	3.33	-0.125	0.0	0.981	0.654	-8.25	1.84
III.83	3.32	-0.128	0.0	0.98	0.65	-7.91	1.83
III.84	3.13	-0.294	0.0	0.839	0.558	-6.55	1.75
III.85	5.39	-0.072	0.0	1.06	0.701	-6.05	4.49
III.86	3.27	-0.103	0.0	1.01	0.673	-5.97	1.78

III.87	3.11	-0.33	0.0	0.811	0.519	-7.21	1.75
III.88	3.29	-0.0749	0.0	1.02	0.678	-6.3	1.79
III.89	1.78	-0.169	2.61	0.905	0.643	-3.19	0.0
III.90	1.91	-0.00898	2.67	1.04	0.732	-4.63	0.0
III.91	2.93	-0.261	2.96	0.968	0.56	-4.77	0.0
III.92	2.93	-0.223	2.95	1.01	0.614	-3.39	0.0
III.93	2.83	-0.369	2.92	0.914	0.433	-5.54	0.0
III.94	0.0	0.0	2.82	0.0	0.352	-4.27	0.0
III.95	0.0	0.0	2.81	0.0	0.351	-3.95	0.0
III.96	1.62	0.0	0.0	0.0	0.739	-5.56	0.0
III.97	0.0	-0.173	2.85	0.0	0.0	-4.32	0.0
III.98	0.0	-0.174	2.84	0.0	0.0	-4.0	0.0
III.99	0.0	-0.122	2.88	1.21	0.747	-4.32	0.0
III.100	0.0	-0.123	2.87	1.21	0.746	-4.0	0.0
III.102	1.67	-0.158	0.0	1.24	1.11	-5.64	0.0
III.104	0.0	-0.359	2.82	0.922	0.317	-4.19	0.0
III.109	1.94	-0.0457	0.0	1.02	1.05	-4.58	2.15
III.110	1.86	-0.154	0.0	0.969	0.944	-5.35	2.11
III.111	1.85	-0.134	0.0	0.991	0.962	-3.8	2.09
III.112	1.99	0.123	0.0	1.11	1.19	-1.67	2.14
III.113	1.95	0.0331	5.32	1.03	0.761	-3.79	2.07
III.114	1.94	0.025	5.25	1.03	0.754	-4.0	2.06
III.115	1.95	0.0391	5.31	1.04	0.766	-3.94	2.07
III.116	1.95	0.0375	5.35	1.04	0.765	-3.67	2.09
III.117	1.88	-0.109	5.24	0.976	0.672	-5.37	2.06
III.118	1.89	-0.101	5.3	0.98	0.679	-5.15	2.06
III.119	1.8	-0.232	5.2	0.906	0.577	-6.22	2.01
III.120	1.81	-0.218	5.25	0.915	0.588	-6.18	2.02

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3S2ds	SsF	SaaaC	SeaC3C3aa	Se1C3N3ds	SsCl	Se1C3C3sa
	34	35	36	37	38	39	40
III.73	2.94	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	2.81	13.5	3.11	2.29	0.0	0.0	0.0
III.75	3.13	0.0	3.18	2.32	3.4	6.1	1.24
III.76	3.15	0.0	3.19	2.33	3.43	0.0	0.0
III.77	3.16	0.0	0.0	0.0	3.54	0.0	0.0
III.79	3.17	0.0	0.0	0.0	3.4	0.0	0.0

III.80	3.08	0.0	0.0	0.0	3.32	6.13	1.22
III.82	2.98	0.0	3.14	2.32	3.17	0.0	0.0
III.83	2.95	0.0	3.13	2.31	3.14	6.17	1.18
III.84	2.83	0.0	0.0	1.17	3.01	0.0	0.906
III.85	3.0	0.0	0.0	0.0	3.16	0.0	0.0
III.86	2.92	0.0	0.0	0.0	3.08	6.12	1.2
III.87	2.82	0.0	0.0	1.16	3.01	0.0	0.887
III.88	2.94	0.0	0.0	0.0	3.11	0.0	1.24
III.89	2.48	0.0	0.0	1.19	0.0	0.0	0.0
III.90	2.6	0.0	3.19	2.32	0.0	0.0	0.0
III.91	3.02	0.0	3.08	2.31	5.18	6.09	1.17
III.92	3.03	0.0	0.0	0.0	5.2	0.0	0.0
III.93	3.0	13.6	3.02	2.3	5.12	0.0	1.09
III.94	1.46	0.0	0.0	1.31	0.0	0.0	0.0
III.95	1.45	0.0	0.0	1.29	0.0	6.01	0.0
III.96	1.63	0.0	0.0	1.31	3.69	0.0	0.0
III.97	1.54	0.0	0.0	1.32	0.0	0.0	0.0
III.98	1.53	0.0	0.0	1.31	0.0	6.02	0.0
III.99	1.64	0.0	0.0	1.35	0.0	0.0	0.0
III.100	1.63	0.0	0.0	1.33	0.0	6.03	0.0
III.102	1.81	0.0	0.0	1.35	4.07	0.0	0.0
III.104	1.52	0.0	0.0	1.3	0.0	6.03	0.0
III.109	0.0	0.0	3.19	3.64	0.0	6.14	1.22
III.110	0.0	13.6	3.13	3.61	0.0	0.0	1.15
III.111	0.0	13.5	0.0	1.29	0.0	0.0	1.15
III.112	0.0	0.0	0.0	1.32	0.0	0.0	1.32
III.113	0.0	0.0	0.0	2.33	0.0	0.0	1.24
III.114	0.0	0.0	0.0	2.28	0.0	6.08	1.24
III.115	0.0	0.0	0.0	2.38	0.0	0.0	1.25
III.116	0.0	0.0	0.0	2.45	0.0	0.0	1.25
III.117	0.0	0.0	0.0	2.26	0.0	12.2	1.17
III.118	0.0	0.0	0.0	2.31	0.0	6.14	1.17
III.119	0.0	13.7	0.0	2.22	0.0	6.08	1.08
III.120	0.0	13.7	0.0	2.33	0.0	0.0	1.09

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	SssO	Se1C3O2as	Se1C1O2ss	Se1C2N3ss	Se1C1C3sa	Se1C3C3ad
	41	42	43	44	45	46

III.73	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	5.31	4.75	5.32	0.0	0.0	0.0
III.77	10.6	9.46	10.6	1.92	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0	2.73	0.0
III.80	5.29	4.69	5.27	0.0	2.71	1.7
III.82	10.5	9.07	5.36	0.0	0.0	0.0
III.83	5.1	4.26	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	5.16	4.29	0.0	0.0	0.0	0.0
III.85	5.19	4.35	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	5.17	4.3	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	10.4	8.96	5.25	0.0	0.0	1.6
III.88	10.5	9.01	5.28	0.0	0.0	1.7
III.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.90	5.3	4.72	5.29	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.92	5.25	4.73	5.3	0.0	0.0	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.94	5.24	4.56	5.16	0.0	0.0	0.0
III.95	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	5.28	4.61	5.22	1.95	0.0	0.0
III.97	5.25	4.58	5.18	0.0	0.0	0.0
III.98	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.99	5.26	4.6	5.2	0.0	0.0	0.0
III.100	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	5.3	4.65	5.26	2.07	0.0	0.0
III.104	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.109	5.21	0.0	0.0	0.0	2.41	0.0
III.110	5.19	0.0	0.0	0.0	2.39	0.0
III.111	5.16	0.0	0.0	0.0	2.37	0.0
III.112	5.17	0.0	0.0	0.0	2.4	0.0
III.113	0.0	0.0	0.0	0.0	2.31	0.729
III.114	0.0	0.0	0.0	0.0	2.3	0.719
III.115	0.0	0.0	0.0	0.0	2.32	0.742
III.116	0.0	0.0	0.0	0.0	4.95	0.76
III.117	0.0	0.0	0.0	0.0	2.3	0.71
III.118	0.0	0.0	0.0	0.0	2.31	0.721
III.119	0.0	0.0	0.0	0.0	2.27	0.684
III.120	0.0	0.0	0.0	0.0	2.29	0.708

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3O2ds	Se1C1C3sd	Se1H1O1s	Se1C3O1as	Se1C2N2ss	Se1N2N2ds
	47	48	49	50	51	52
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.77	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.80	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.82	3.79	1.68	0.0	0.0	0.0	0.0
III.83	3.77	1.67	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	3.78	1.65	4.64	8.8	0.0	0.0
III.85	3.84	1.68	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	3.79	1.66	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	3.79	1.65	4.66	8.85	0.0	0.0
III.88	3.81	1.67	0.0	0.0	0.0	0.0
III.89	0.0	0.0	4.52	8.56	0.0	0.0
III.90	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0	3.08	0.0
III.92	0.0	0.0	0.0	0.0	3.09	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0	3.06	0.0
III.94	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.87
III.95	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.82
III.96	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.99
III.98	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.99	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.100	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.104	0.0	0.0	4.4	0.0	0.0	0.0
III.109	4.23	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.110	4.21	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.111	4.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.112	4.17	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.113	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.114	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.115	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.116	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

III.117	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.118	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.119	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.120	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3N2dd	Se1C2S2ss	Se1C3S2ss	Se1N2N2sd	Se1C3C3sd	Se1C1C2ss
	53	54	55	56	57	58
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.77	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.80	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.82	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.83	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.85	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.88	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.89	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.90	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.92	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.94	2.88	1.55	0.0	0.0	0.0	0.0
III.95	2.86	1.54	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	0.0	1.68	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	3.07	0.0	1.3	0.0	0.0	0.0
III.98	3.05	0.0	1.3	4.94	0.577	0.0
III.99	3.24	0.0	1.45	5.1	0.708	2.83
III.100	3.22	0.0	1.44	5.05	0.705	2.82
III.102	0.0	0.0	1.54	0.0	0.848	2.91
III.104	3.13	0.0	1.27	5.01	0.532	0.0
III.109	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.45
III.110	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.44

III.111	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.43
III.112	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.45
III.113	0.0	0.0	0.0	4.84	0.0	0.0
III.114	0.0	0.0	0.0	4.82	0.0	0.0
III.115	0.0	0.0	0.0	4.86	0.0	0.0
III.116	0.0	0.0	0.0	4.95	0.0	0.0
III.117	0.0	0.0	0.0	4.84	0.0	0.0
III.118	0.0	0.0	0.0	4.86	0.0	0.0
III.119	0.0	0.0	0.0	4.82	0.0	0.0
III.120	0.0	0.0	0.0	4.86	0.0	0.0

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для навчальної вибірки набору
сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори			
	SeaC3S2aa	Se1C2O2ss	SsBr	SeaC2S2aa
	59	60	61	62
III.73	0.0	0.0	0.0	0.0
III.74	0.0	0.0	0.0	0.0
III.75	0.0	0.0	0.0	0.0
III.76	0.0	0.0	0.0	0.0
III.77	0.0	0.0	0.0	0.0
III.79	0.0	0.0	0.0	0.0
III.80	0.0	0.0	0.0	0.0
III.82	0.0	0.0	0.0	0.0
III.83	0.0	0.0	0.0	0.0
III.84	0.0	0.0	0.0	0.0
III.85	0.0	0.0	0.0	0.0
III.86	0.0	0.0	0.0	0.0
III.87	0.0	0.0	0.0	0.0
III.88	0.0	0.0	0.0	0.0
III.89	0.0	0.0	0.0	0.0
III.90	0.0	0.0	0.0	0.0
III.91	0.0	0.0	0.0	0.0
III.92	0.0	0.0	0.0	0.0
III.93	0.0	0.0	0.0	0.0
III.94	0.0	0.0	0.0	0.0
III.95	0.0	0.0	0.0	0.0
III.96	0.0	0.0	0.0	0.0
III.97	0.0	0.0	0.0	0.0
III.98	0.0	0.0	0.0	0.0

III.99	0.0	0.0	0.0	0.0
III.100	0.0	0.0	0.0	0.0
III.102	0.0	0.0	0.0	0.0
III.104	0.0	0.0	0.0	0.0
III.109	2.45	4.6	0.0	0.0
III.110	2.4	4.59	0.0	0.0
III.111	2.39	4.55	3.46	0.0
III.112	4.27	4.56	0.0	2.36
III.113	3.95	0.0	3.41	2.32
III.114	3.93	0.0	0.0	2.32
III.115	3.97	0.0	0.0	2.33
III.116	4.0	0.0	0.0	2.34
III.117	2.18	0.0	0.0	0.0
III.118	2.19	0.0	3.41	0.0
III.119	2.11	0.0	3.46	0.0
III.120	2.14	0.0	3.47	0.0

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	ALogPS logP	ALogPS logS	Se1N2N3ds	SdS	Se1C3C3dd	Se1C3C3da
	1	2	3	4	5	6
III.72	3.57	-5.0	4.99	5.09	0.833	1.73
III.78	4.78	-5.68	5.18	5.56	0.926	1.75
III.81	6.11	-6.25	5.21	5.59	0.913	1.71
III.101	4.99	-4.19	0.0	0.0	0.0	0.0
III.103	3.42	-4.25	0.0	0.0	0.0	0.0
III.105	4.81	-4.56	0.0	0.0	0.0	0.0
III.106	4.51	-3.95	0.0	0.0	0.0	0.0
III.107	4.91	-4.23	0.0	0.0	0.0	0.0
III.108	5.32	-5.53	5.09	0.0	0.0	2.63
III.121	5.42	-5.93	5.04	0.0	0.512	2.54

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C1H1s	SdsCH	Se1C3H1s	SsH	SdsN	Se1C3C3as	Se2C3O1s

	7	8	9	10	11	12	13
III.72	-0.0985	1.78	-2.04	-3.93	4.79	1.25	9.03
III.78	0.198	1.83	-2.17	-4.14	4.91	1.25	10.4
III.81	0.347	1.83	-2.21	-3.17	4.98	0.0	10.4
III.101	-0.341	1.69	-1.73	-6.3	8.77	0.0	10.4
III.103	-0.535	1.67	-1.83	-10.1	8.3	0.0	18.2
III.105	-0.282	1.62	-1.8	-9.42	8.34	0.0	18.4
III.106	-0.284	1.66	-1.97	-8.6	8.76	0.0	10.7
III.107	-0.719	1.65	-2.03	-13.6	8.82	0.0	20.0
III.108	0.0679	0.0	-2.09	-6.34	4.9	0.0	9.49
III.121	-1.03	0.0	-2.3	-6.32	9.02	0.0	19.2

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C1N3ss	Se2C3N2ss	SdssC	Se1C2N3ds	SeaC2C3aa	SeaC2C2aa
	14	15	16	17	18	19
III.72	0.0	4.37	1.83	2.93	14.6	18.5
III.78	0.0	4.5	1.93	3.05	24.3	24.9
III.81	0.0	4.54	1.87	3.04	34.9	24.6
III.101	0.0	3.73	0.572	0.0	17.9	23.5
III.103	0.0	3.48	-0.233	0.0	15.6	17.8
III.105	0.0	3.41	-0.143	0.0	15.1	17.5
III.106	0.0	3.78	0.382	0.0	17.9	23.5
III.107	0.0	3.85	-0.0298	0.0	18.0	23.6
III.108	0.0	4.44	0.672	0.0	14.4	18.5
III.121	0.0	7.68	0.127	0.0	25.1	14.3

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SaasC	Se1C3N2ds	Se1C2H1s	Se1C2C3sd	Se1H1N2s	SaaCH	SsCH3
	20	21	22	23	24	25	26
III.72	2.99	4.68	-2.68	1.66	-0.0128	18.0	1.65
III.78	4.88	0.0	-2.86	1.67	0.0	25.9	3.67
III.81	4.69	0.0	-3.02	1.64	0.0	30.0	2.02
III.101	5.21	0.0	-2.95	0.0	0.0	25.2	3.52
III.103	4.29	2.67	-4.63	0.0	-0.151	19.5	2.96

III.105	4.1	5.27	-4.58	0.0	-0.0708	19.3	1.34
III.106	5.04	0.0	-8.25	0.0	0.0	25.0	1.63
III.107	4.96	0.0	-8.32	0.0	0.0	24.9	2.98
III.108	4.86	0.0	-4.71	1.67	0.0	17.9	3.64
III.121	6.01	4.43	-3.07	1.55	-0.633	19.6	1.75

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	SsssN	SsssCH	SssNH	Se1C2C3ss	SssCH2	Se1C2H1a	Se1C3N3as
	27	28	29	30	21	32	33
III.72	1.86	0.0011	2.65	1.07	0.747	-3.01	0.0
III.78	3.48	-0.038	0.0	1.05	0.727	-5.06	1.97
III.81	3.48	-0.076	0.0	1.02	0.692	-6.49	1.96
III.101	1.64	-0.209	0.0	0.0	0.38	-5.64	0.0
III.103	0.0	-0.391	2.84	0.988	0.577	-4.59	0.0
III.105	0.0	-0.367	2.7	1.01	0.593	-4.29	0.0
III.106	1.58	-0.394	0.0	0.952	0.587	-5.95	0.0
III.107	1.58	-0.427	0.0	1.02	0.82	-6.07	0.0
III.108	1.93	-0.011	0.0	1.06	1.09	-2.92	2.14
III.121	1.81	-0.224	5.26	0.91	0.583	-6.0	2.01

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори						
	Se1C3S2ds	SsF	SaaaC	SeaC3C3aa	Se1C3N3ds	SsCl	Se1C3C3sa
	34	35	36	37	38	39	40
III.72	2.88	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	3.11	0.0	0.0	0.0	3.35	0.0	0.0
III.81	3.09	0.0	3.18	2.33	3.33	6.17	1.22
III.101	1.71	0.0	0.0	1.33	3.86	0.0	0.0
III.103	1.58	0.0	0.0	1.32	0.0	0.0	0.0
III.105	1.57	0.0	0.0	1.28	0.0	6.04	0.0
III.106	1.71	0.0	0.0	1.32	3.87	0.0	0.0
III.107	1.75	0.0	0.0	1.33	3.96	0.0	0.0
III.108	0.0	0.0	0.0	1.32	0.0	6.08	1.24
III.121	0.0	13.7	0.0	2.27	0.0	0.0	1.08

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	SssO	Se1C3O2as	Se1C1O2ss	Se1C2N3ss	Se1C1C3sa	Se1C3C3ad
	41	42	43	44	45	46
III.72	5.26	4.68	5.25	0.0	0.0	0.0
III.78	5.32	4.76	5.33	0.0	2.72	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0	2.71	0.0
III.101	5.29	4.63	5.24	2.0	0.0	0.0
III.103	10.2	4.61	5.21	0.0	0.0	0.0
III.105	4.91	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.106	5.29	4.64	5.25	1.99	0.0	0.0
III.107	10.4	4.66	5.27	2.02	0.0	0.0
III.108	5.18	0.0	0.0	0.0	2.4	0.0
III.121	0.0	0.0	0.0	0.0	2.28	0.695

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3O2ds	Se1C1C3sd	Se1H1O1s	Se1C3O1as	Se1C2N2ss	Se1N2N2ds
	47	48	49	50	51	52
III.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.101	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.103	4.07	1.83	0.0	0.0	0.0	5.13
III.105	4.07	1.83	0.0	0.0	0.0	0.0
III.106	0.0	0.0	4.63	0.0	0.0	0.0
III.107	4.22	1.87	0.0	0.0	0.0	0.0
III.108	4.19	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.121	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Продовж. дод. А.10

**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

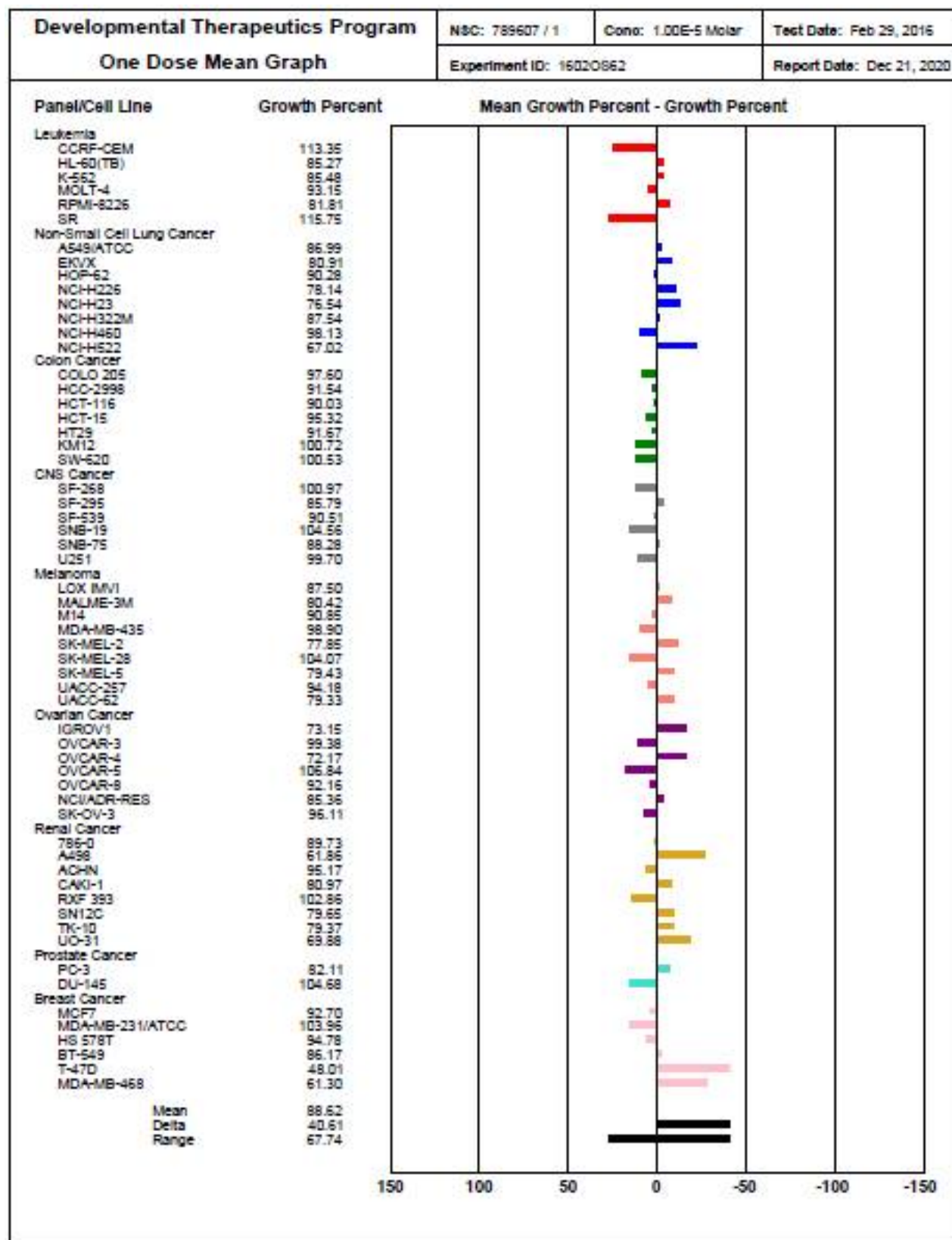
№ п/п	Дескриптори					
	Se1C3N2dd	Se1C2S2ss	Se1C3S2ss	Se1N2N2sd	Se1C3C3sd	Se1C1C2ss
	53	54	55	56	57	58
III.72	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
III.101	0.0	0.0	1.4	0.0	0.72	0.0
III.103	3.25	0.0	1.32	0.0	0.0	0.0
III.105	0.0	0.0	1.35	0.0	0.648	0.0
III.106	0.0	0.0	1.37	0.0	0.676	0.0
III.107	0.0	0.0	1.42	0.0	0.713	0.0
III.108	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.45
III.121	0.0	0.0	0.0	4.84	0.0	0.0

Продовж. дод. А.10

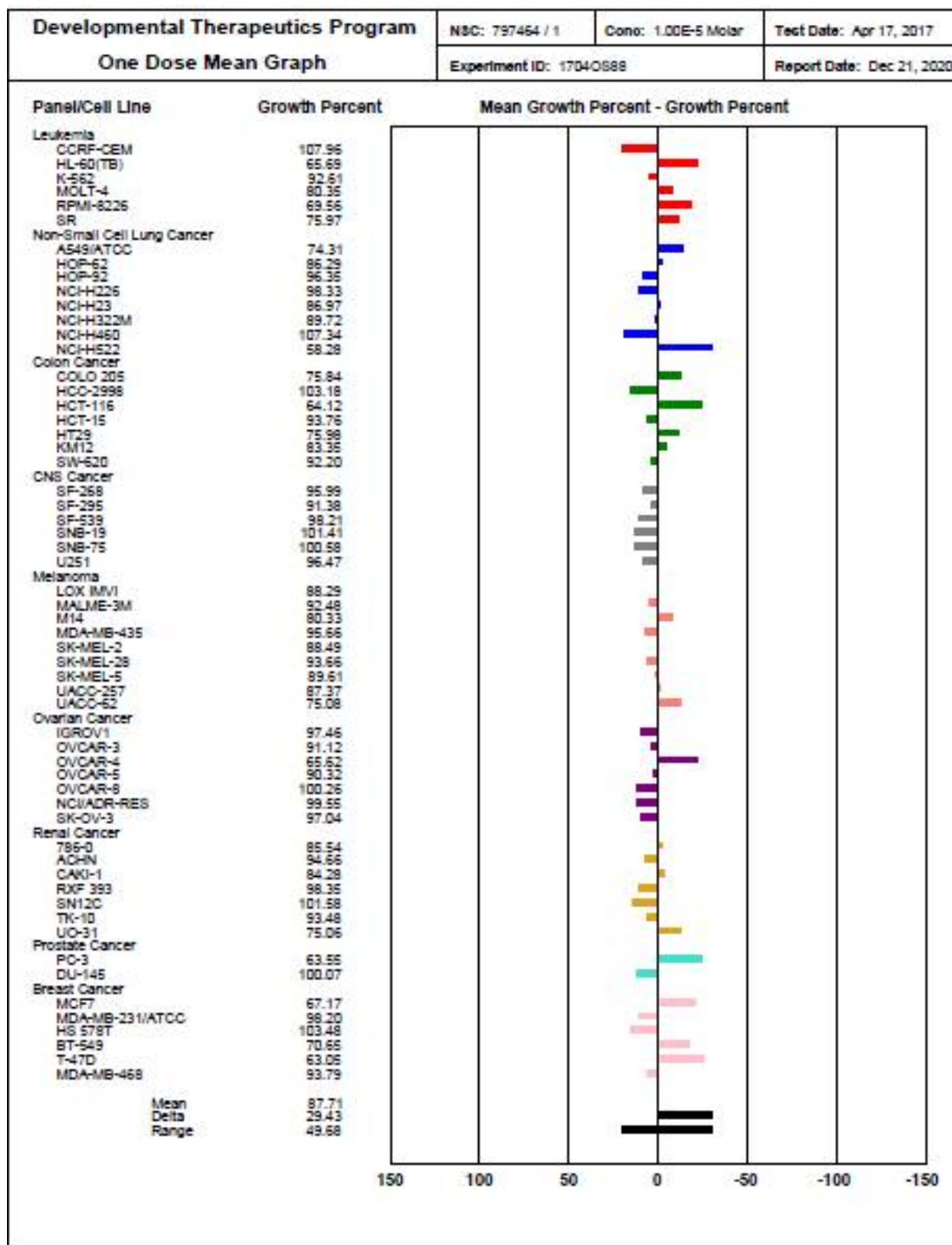
**Значення відібраних дескрипторів для тестованої вибірки
набору сполук №4 (модель *RFR*)**

№ п/п	Дескриптори			
	SeaC3S2aa	Se1C2O2ss	SsBr	SeaC2S2aa
	59	60	61	62
III.72	0.0	0.0	0.0	0.0
III.78	0.0	0.0	0.0	0.0
III.81	0.0	0.0	0.0	0.0
III.101	0.0	0.0	0.0	0.0
III.103	0.0	4.7	0.0	0.0
III.105	0.0	4.7	0.0	0.0
III.106	0.0	0.0	0.0	0.0
III.107	0.0	4.88	0.0	0.0
III.108	2.46	4.57	0.0	0.0
III.121	2.12	0.0	6.87	0.0

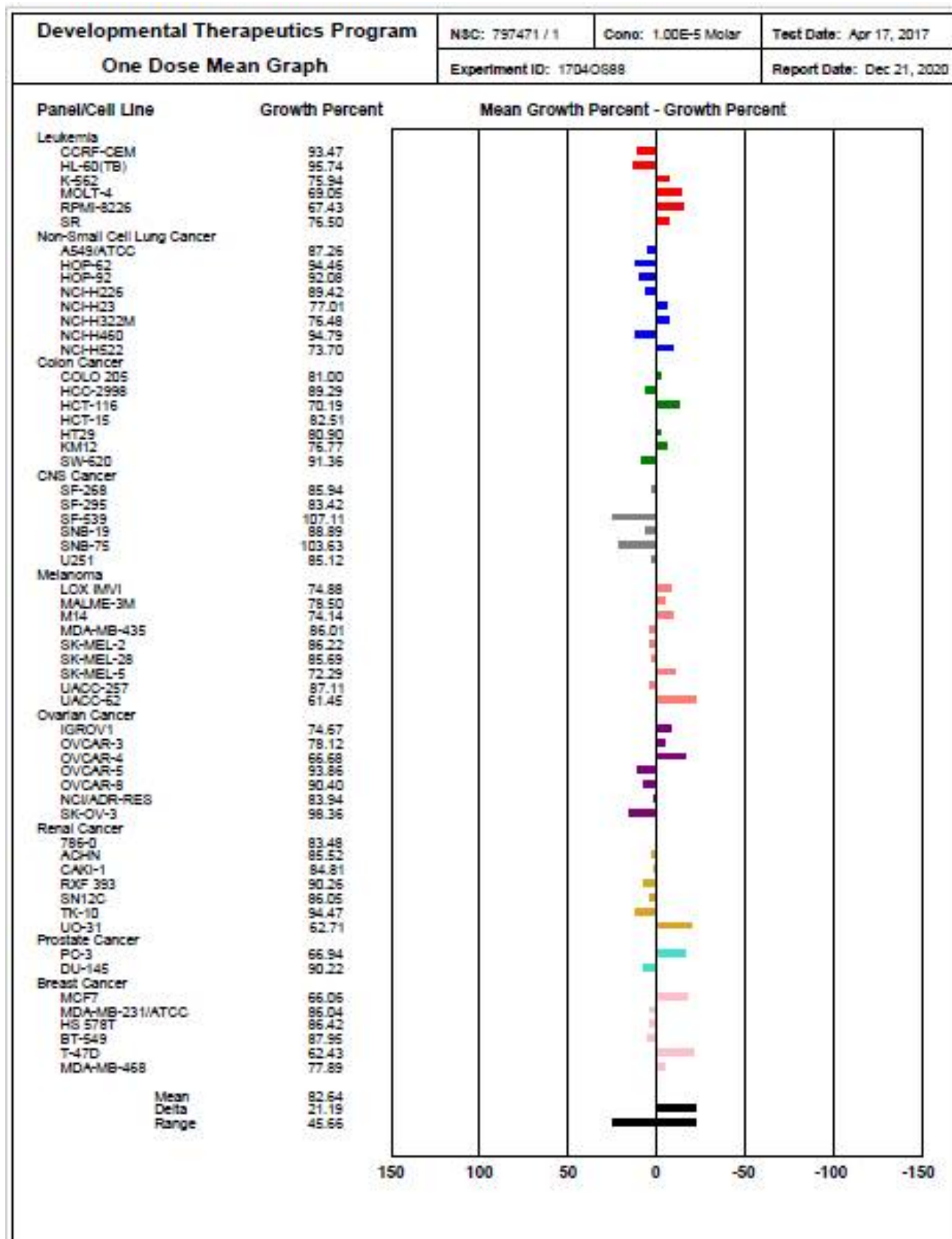
Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-(5-амінометилєн-4-оксо-2-тіоксотіазолідин-3-іл)-3-фенілпропанової кислоти 4.21 (10⁻⁵M)



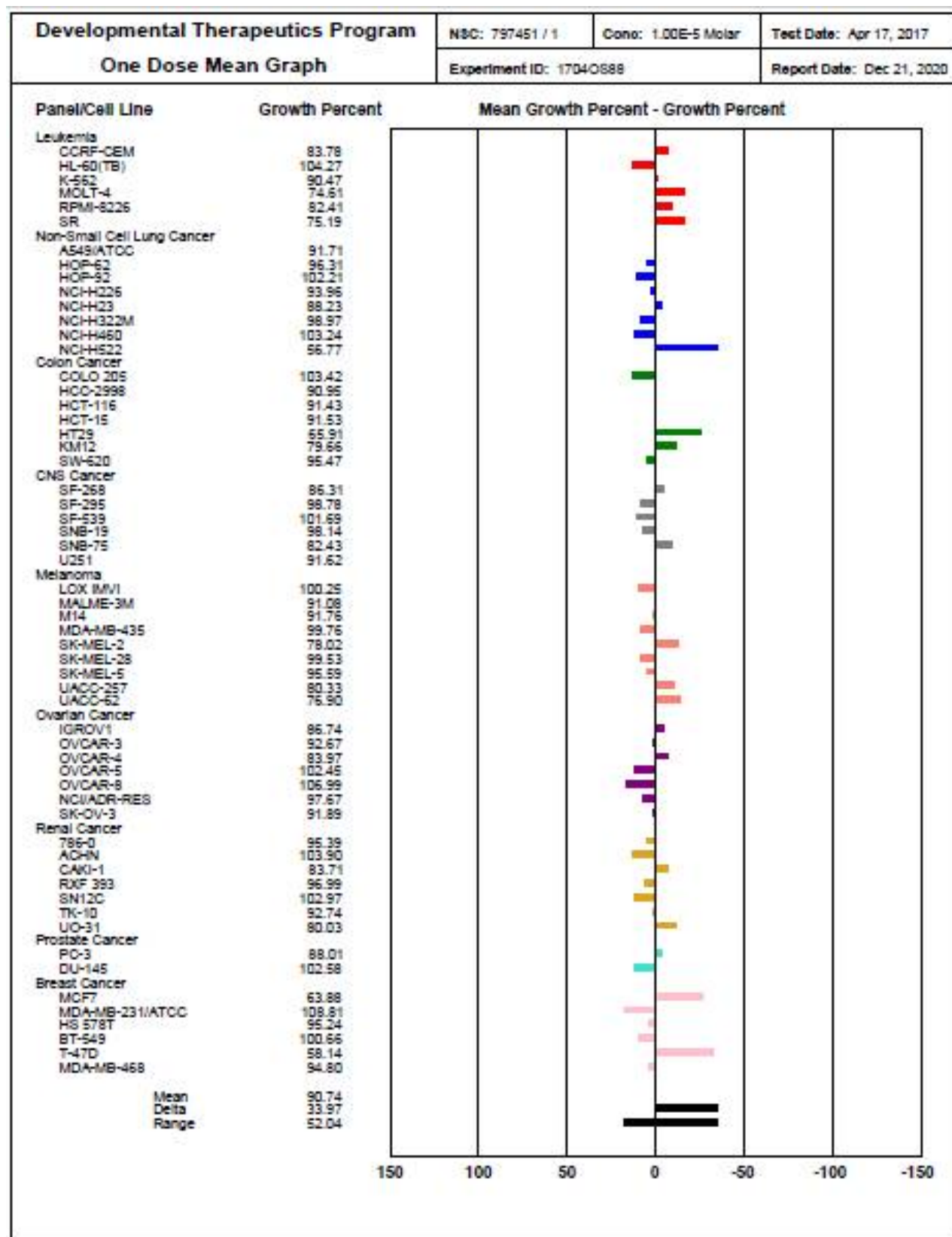
**Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру
2-(4-оксо-5-феніламінометилден-2-тіоксотіазолідин-3-іл)-3-фенілпропанової
кислоти 4.22 (10^{-5}M)**



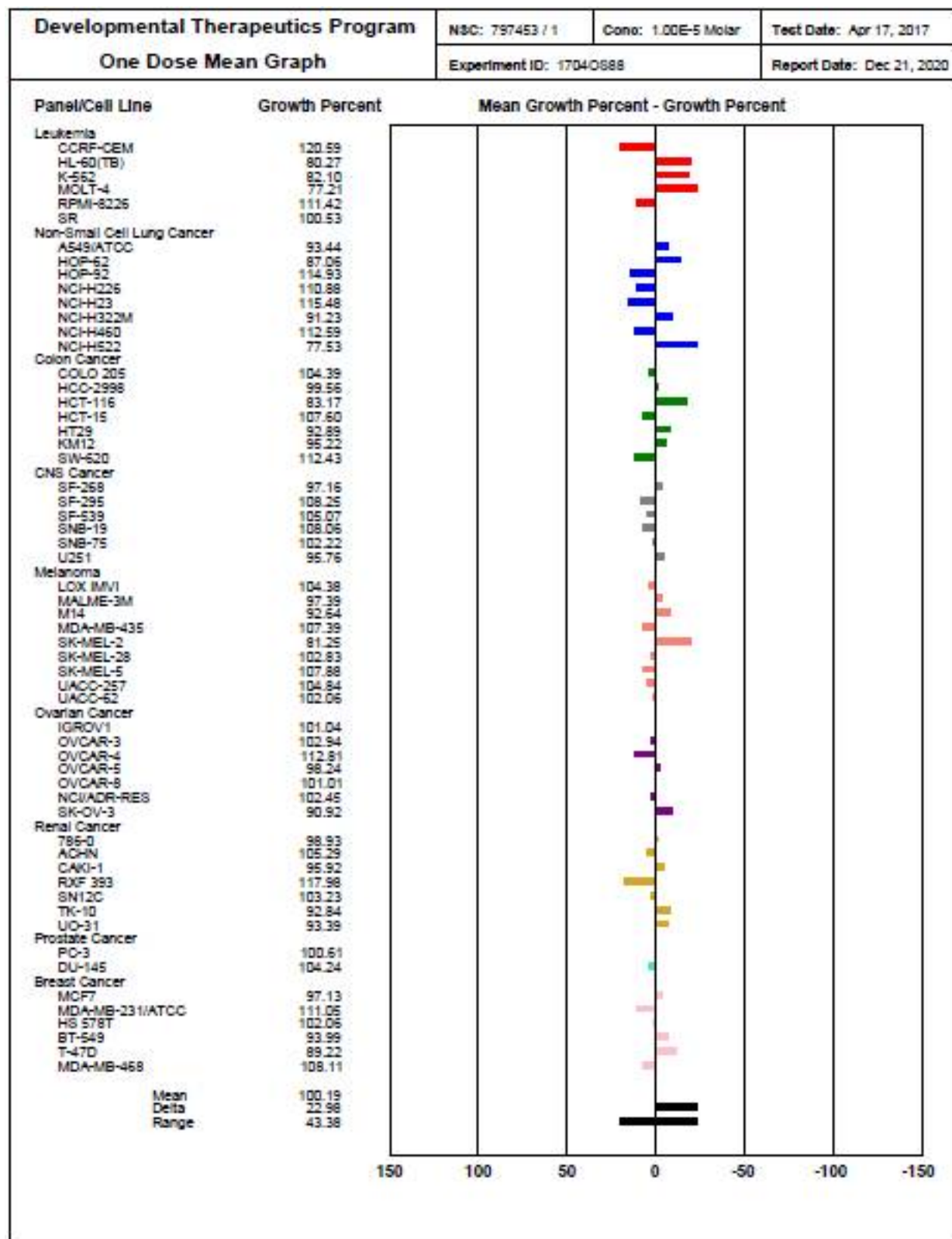
Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-{5-[(4-флюорофеніламіно)-метилєн]-4-оксо-2-тіоксотіазолідин-3-іл}-3-фенілпропанової кислоти 4.24 (10⁻⁵М)



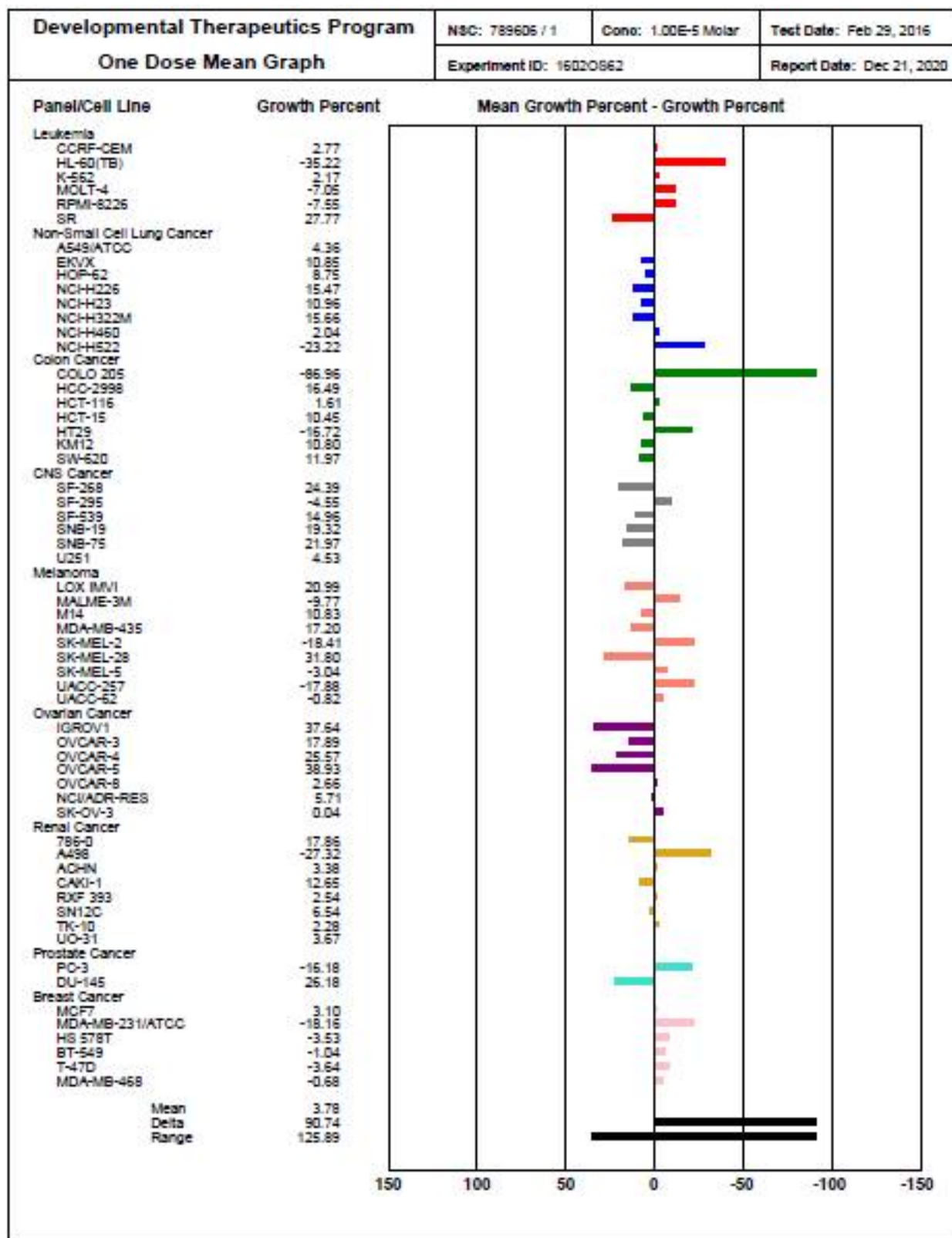
Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-{5-[(5-хлоро-2-метоксифеніламіно)-метилєн]-4-оксо-2-тіоксотіазолідин-3-іл}-3-фенілпропанової кислоти 4.26 (10⁻⁵M)



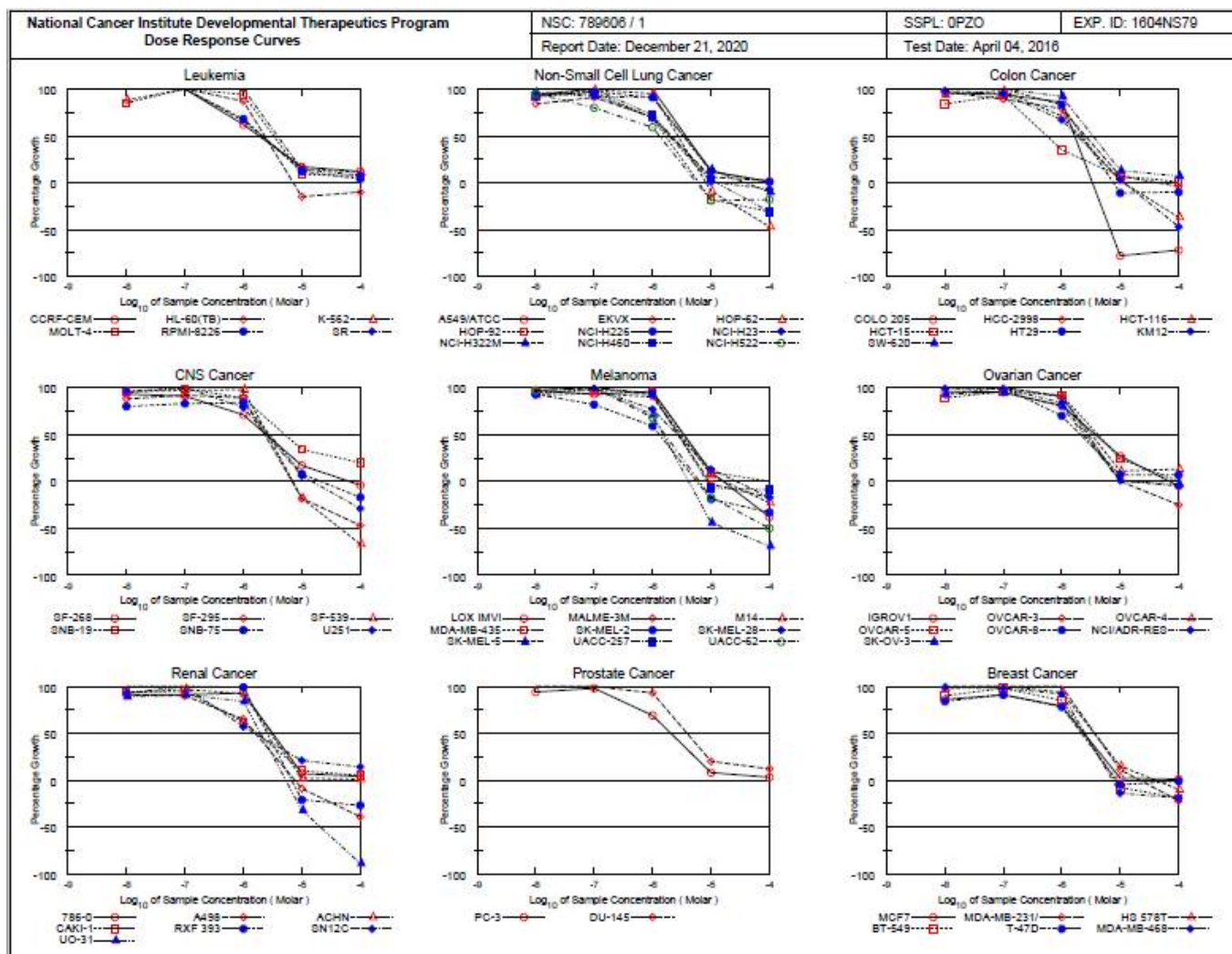
Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-{5-[(4-етилсульфанілтіосульффонфеніламіно)-метилєн]-4-оксо-2-тіоксотіазолідин-3-іл}-3-фенілпропанової кислоти 4.29 ($10^{-5}M$)



Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-(5-{[5-(2,4-дихлоробензил)-тіазол-2-іламіно]-метиле́н}-4-оксо-2-тіоксотіазолі́дин-3-іл)-3-фенілпропанової кислоти 4.32 (10⁻⁵М)



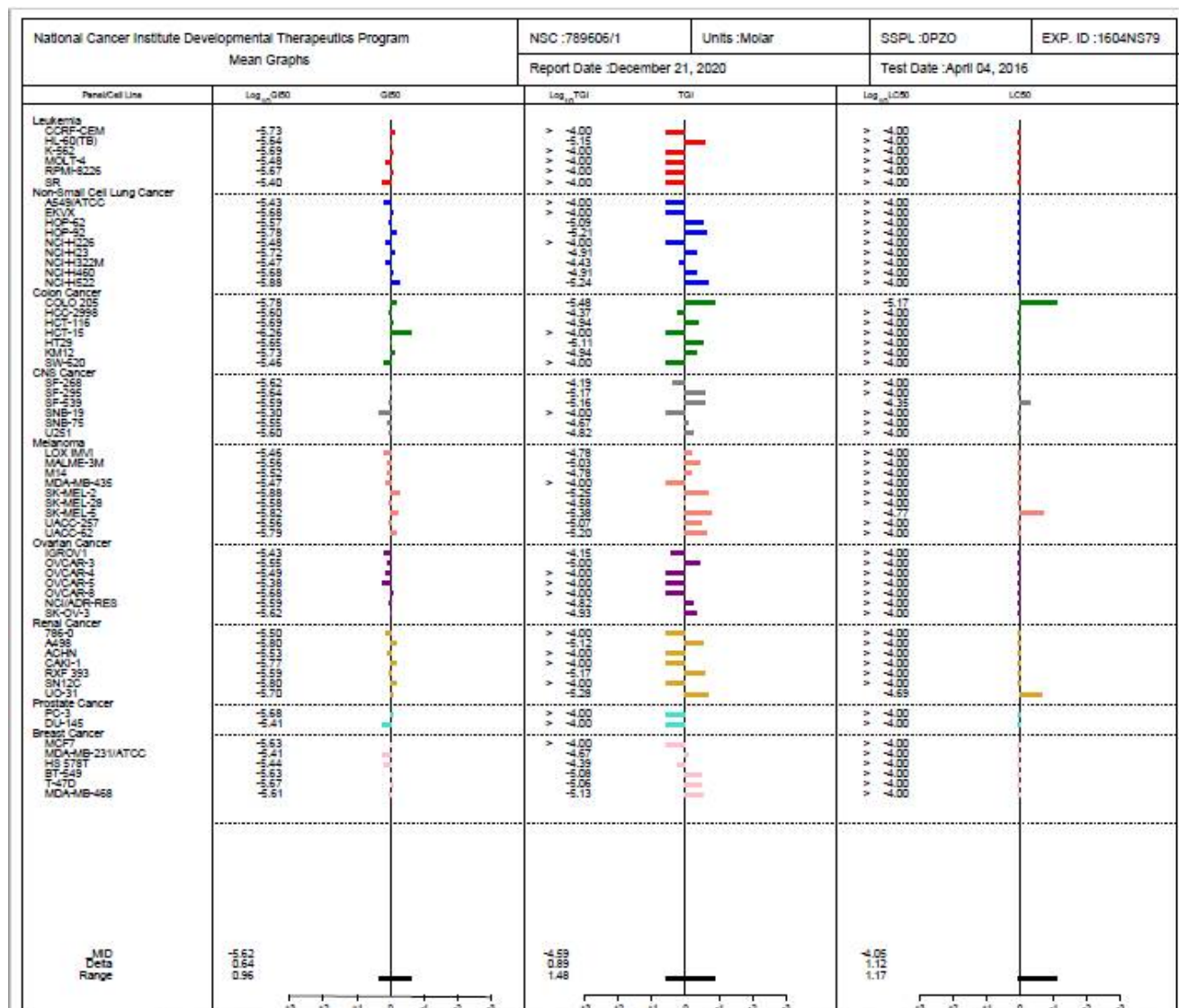
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.32 у градієнті концентрацій



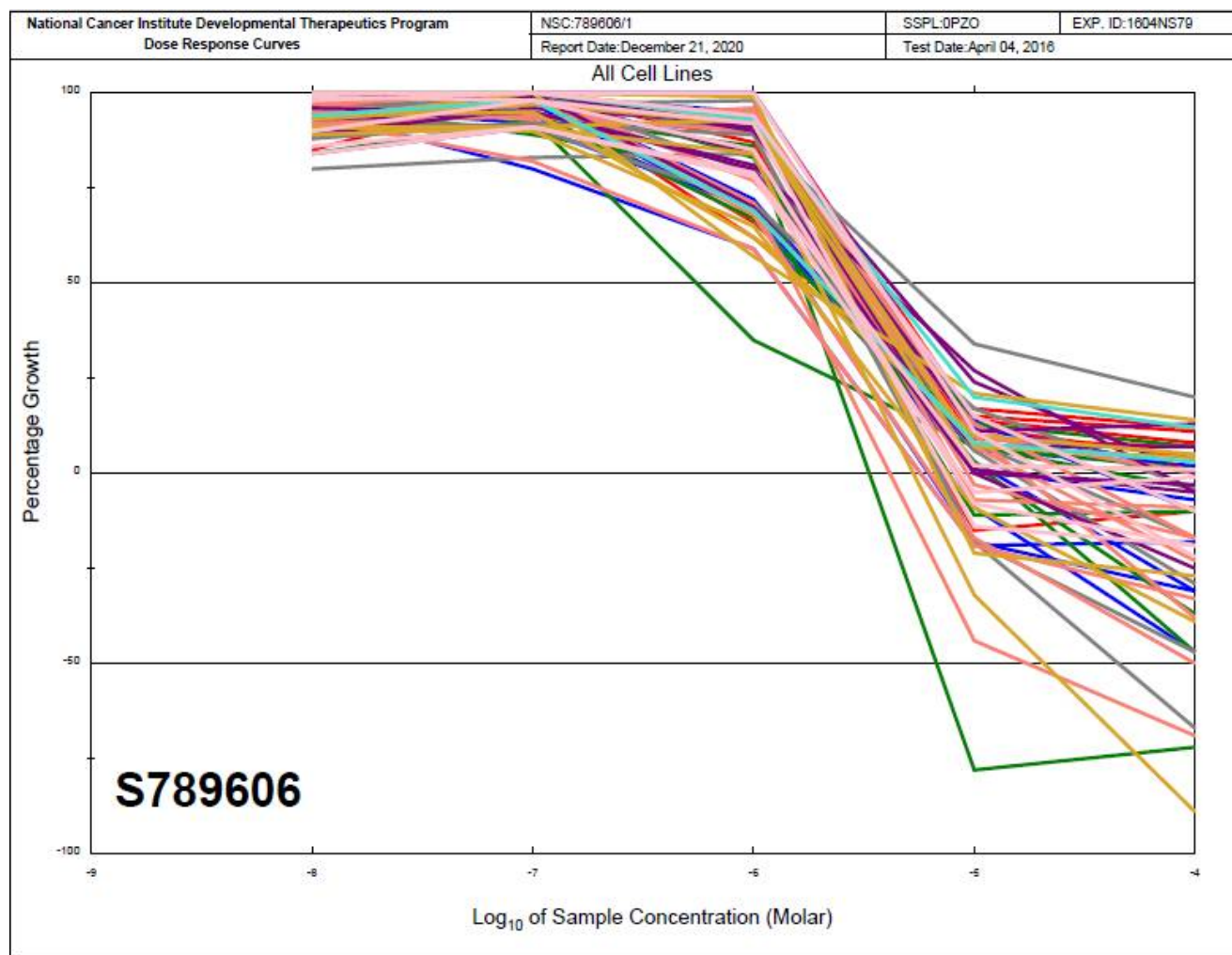
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.32 у градієнті концентрацій

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results																	
NSC : 789605 / 1			Experiment ID : 1604NS79						Test Type : D8				Units : Molar				
Report Date : December 21, 2020			Test Date : April 04, 2016						QNS :				MC :				
CCMI : Les-5806			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related						SSPL : DP20								
Panel/Cell Line	Time Zero	Ctrl	Log10 Concentration						Percent Growth						GI50	TGI	LC50
			-6.0	-7.0	-8.0	-9.0	-10.0	-6.0	-7.0	-8.0	-9.0	-10.0					
Leukemia																	
CCRF-CEM	0.504	2.227	2.230	2.323	1.586	0.810	0.736	100	106	82	17	12	1.87E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HL-60(TB)	1.143	2.786	2.799	2.837	2.551	0.967	1.029	102	104	87	-15	-10	2.29E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
K-562	0.311	1.736	1.585	1.948	1.246	0.521	0.463	86	115	95	15	11	2.03E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
MOLT-4	0.776	2.463	2.215	2.647	2.366	0.922	0.696	85	111	94	9	7	3.29E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
RPMI-6226	0.824	2.923	2.976	3.044	2.261	1.073	0.914	103	106	89	12	4	2.12E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SR	0.337	1.116	1.149	1.175	1.147	0.446	0.398	104	108	104	14	8	3.98E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
Non-Small Cell Lung Cancer																	
A549/ATCC	0.516	1.765	1.693	1.762	1.760	0.665	0.520	94	101	100	12	1	3.69E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
ECVX	0.743	2.316	2.061	2.175	1.647	0.840	0.774	84	91	70	6	2	2.07E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-62	0.754	2.064	1.976	2.045	1.997	0.693	0.390	93	99	95	-4	-47	2.69E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-92	1.074	1.867	1.840	1.886	1.496	0.662	0.744	92	97	89	-18	-31	1.65E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-H26	1.403	2.661	2.579	2.637	2.566	1.552	1.417	92	97	91	12	1	3.29E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-H23	0.903	2.627	2.583	2.524	2.094	0.916	0.837	96	94	89	1	-7	1.90E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-H22M	0.755	1.866	1.844	1.796	1.763	0.608	0.670	96	92	91	14	-10	3.39E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-H460	0.288	2.853	2.964	2.991	2.136	0.373	0.198	104	105	72	3	-31	2.09E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HOP-H22	1.015	1.864	1.821	1.696	1.516	0.822	0.835	95	80	59	-19	-18	1.31E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
Colon Cancer																	
COLO 205	0.491	1.853	1.794	1.771	1.864	0.106	0.136	96	94	96	-76	-72	1.66E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4	6.72E-6	
HCC-2998	0.660	2.642	2.583	2.459	2.276	1.026	0.869	97	89	79	7	-4	2.54E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HCT-116	0.266	2.146	2.040	2.103	1.804	0.312	0.167	94	98	71	2	-37	2.03E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HCT-15	0.471	2.619	2.385	2.470	1.217	0.614	0.465	84	93	35	7	1	5.46E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
HT29	0.397	1.972	2.063	2.001	1.701	0.355	0.359	105	102	83	-11	-10	2.24E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
KM12	0.652	2.762	2.722	2.661	2.063	0.722	0.343	96	95	67	3	-47	1.84E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SW-620	0.271	1.656	1.679	1.662	1.736	0.465	0.396	101	101	92	13	7	3.45E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
CNS Cancer																	
SF-265	0.669	2.157	2.047	2.025	1.718	0.909	0.634	93	91	71	17	-4	2.42E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SF-295	0.750	2.294	2.110	2.170	2.119	0.619	0.395	86	92	89	-18	-47	2.31E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SF-839	1.107	3.063	2.991	2.996	3.024	0.903	0.363	96	97	96	-16	-67	2.58E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4	4.43E-6	
SNB-19	0.611	2.261	2.205	2.267	2.116	1.306	1.102	95	99	89	34	20	5.05E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SNB-75	0.665	1.690	1.530	1.553	1.563	0.961	0.745	80	83	84	8	-17	2.81E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
U251	0.510	2.066	2.040	2.191	1.757	0.606	0.365	96	106	79	6	-29	2.51E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
Melanoma																	
LOX IMVI	0.313	1.666	1.839	1.779	1.821	0.470	0.195	97	93	96	10	-36	3.44E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
MALME-3M	0.713	1.461	1.460	1.501	1.423	0.690	0.594	97	103	92	-3	-17	2.77E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
M14	0.494	1.942	1.824	1.856	1.796	0.590	0.379	92	94	90	7	-23	3.02E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
MDA-MB-435	0.476	2.393	2.300	2.333	2.256	0.674	0.481	95	97	95	10		3.38E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SK-MEL-2	0.937	2.142	2.056	1.927	1.850	0.757	0.629	93	82	59	-19	-33	1.31E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SK-MEL-28	0.907	2.702	2.573	2.683	2.263	1.136	0.749	93	99	77	13	-17	2.61E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SK-MEL-45	1.062	3.237	3.230	3.236	2.606	0.591	0.333	100	100	71	-44	-69	1.52E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4	1.70E-6	
UACC-257	1.186	2.101	2.099	2.137	2.044	1.106	1.064	100	104	94	-7	-9	2.72E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
UACC-62	0.690	2.244	2.199	2.273	1.809	0.743	0.446	97	102	68	-17	-50	1.63E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
Ovarian Cancer																	
IGROV1	0.553	1.847	1.795	1.781	1.597	0.903	0.528	96	95	81	27	-5	3.73E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
OVCAR-3	0.539	1.744	1.753	1.744	1.650	0.838	0.402	101	100	91		-25	2.84E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
OVCAR-4	0.763	1.722	1.655	1.730	1.626	0.870	0.886	93	101	90	11	13	3.22E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
OVCAR-5	0.711	2.014	1.875	1.961	1.912	1.030	0.717	89	96	92	24		4.20E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
OVCAR-8	0.801	2.124	2.189	2.206	1.666	0.704	0.710	104	105	70	7	7	2.07E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
NOGAD-RES	0.595	1.867	1.873	1.871	1.676	0.611	0.563	99	99	94	1	-5	2.56E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SK-OV-3	0.917	2.043	1.962	1.990	1.616	0.920	0.691	93	95	80		-3	2.38E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
Renal Cancer																	
786-O	0.664	2.342	2.106	2.093	2.127	0.776	0.721	91	91	93	7	4	3.15E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
A-680	1.558	2.469	2.379	2.365	2.141	1.425	0.948	91	90	85	-9	-39	1.50E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
ACHN	0.497	2.141	2.023	2.093	2.004	0.532	0.516	93	97	92	2	1	2.92E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
CAKI-1	0.592	3.057	2.916	2.943	2.123	0.890	0.716	94	95	82	10	5	1.71E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
RXFP 363	1.137	1.700	1.696	1.729	1.694	0.901	0.834	100	105	99	-21	-27	2.56E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
SN12C	0.662	2.763	2.656	2.762	1.971	1.267	1.152	93	100	57	21	14	1.59E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
UC-31	0.661	2.223	2.075	2.105	2.013	0.599	0.694	89	91	84	-32	-69	1.97E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4	2.06E-6	
Prostate Cancer																	
PC-3	0.474	1.652	1.770	1.820	1.431	0.590	0.512	94	98	89	8	3	2.08E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
DU-146	0.395	1.750	1.793	1.755	1.661	0.666	0.593	103	100	93	20	12	3.90E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
Breast Cancer																	
MCF7	0.707	2.761	2.501	2.596	2.336	0.746	0.729	86	91	79	2	1	2.36E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
MDA-MB-231/ATCC	0.560	1.571	1.607	1.656	1.629	0.704	0.466	104	109	106	11	-22	3.88E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
H5 576T	1.065	2.030	2.007	2.068	1.974	1.211	0.964	96	104	94	15	-10	3.62E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
BT-549	1.161	2.229	2.119	2.203	2.064	1.070	0.946	90	98	85	-9	-19	2.37E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
T-47D	0.801	1.729	1.562	1.642	1.520	0.762	0.793	84	91	70	-5	-1	2.16E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		
MDA-MB-468	1.079	1.660	1.676	1.663	1.614	0.926	0.876	99	98	92	-14	-19	2.48E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4		

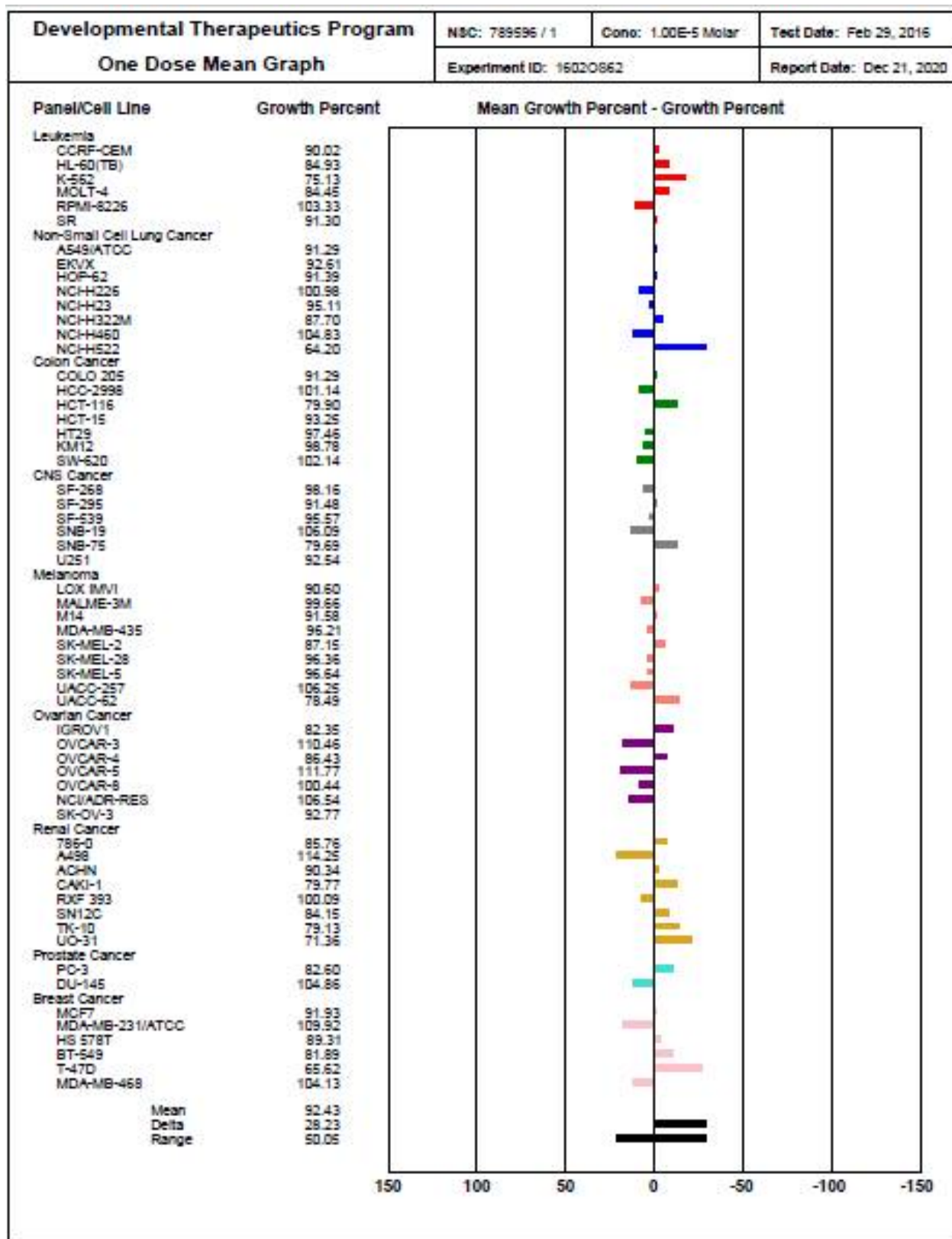
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.32 у градієнті концентрацій



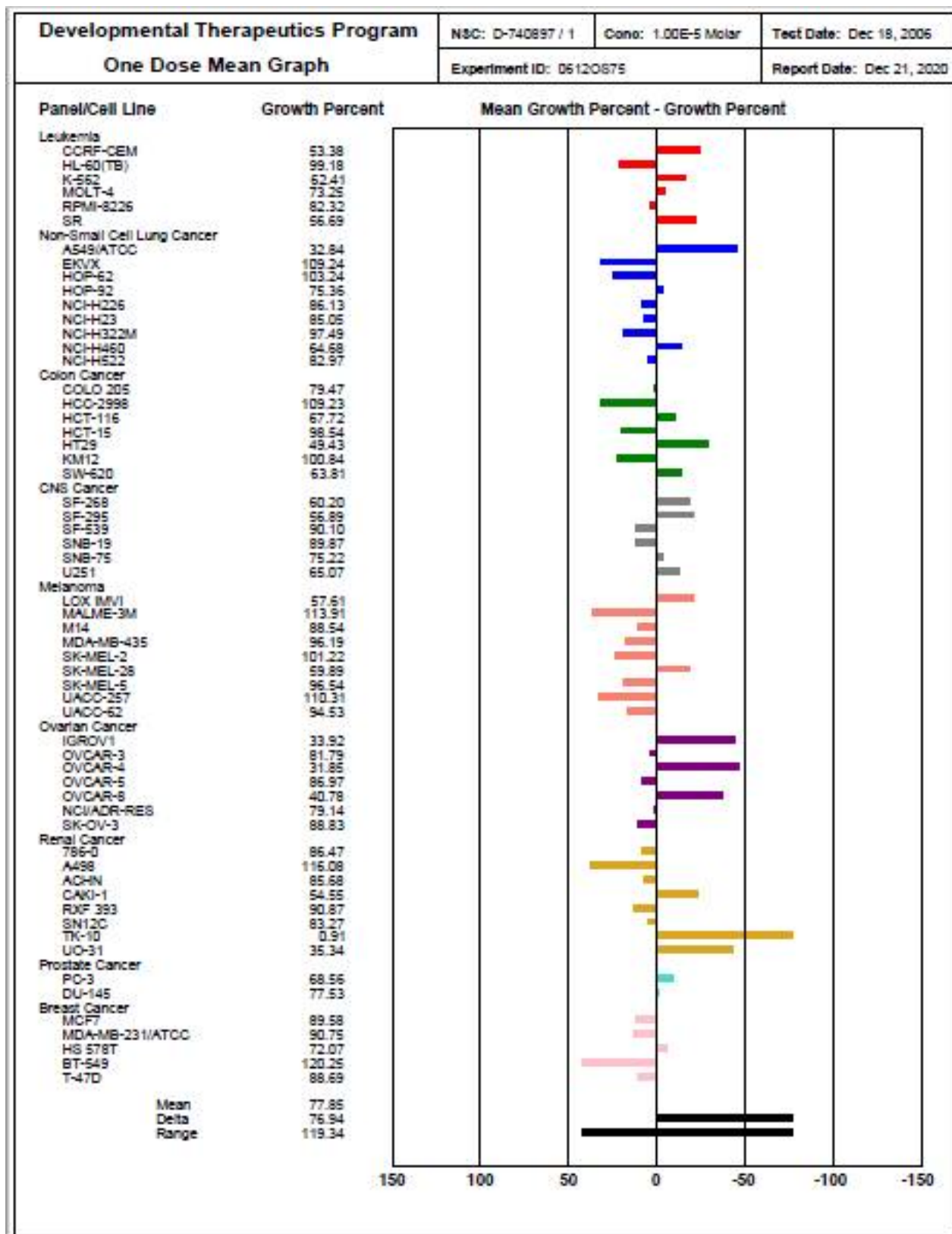
**Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.32 у градієнті
концентрацій**



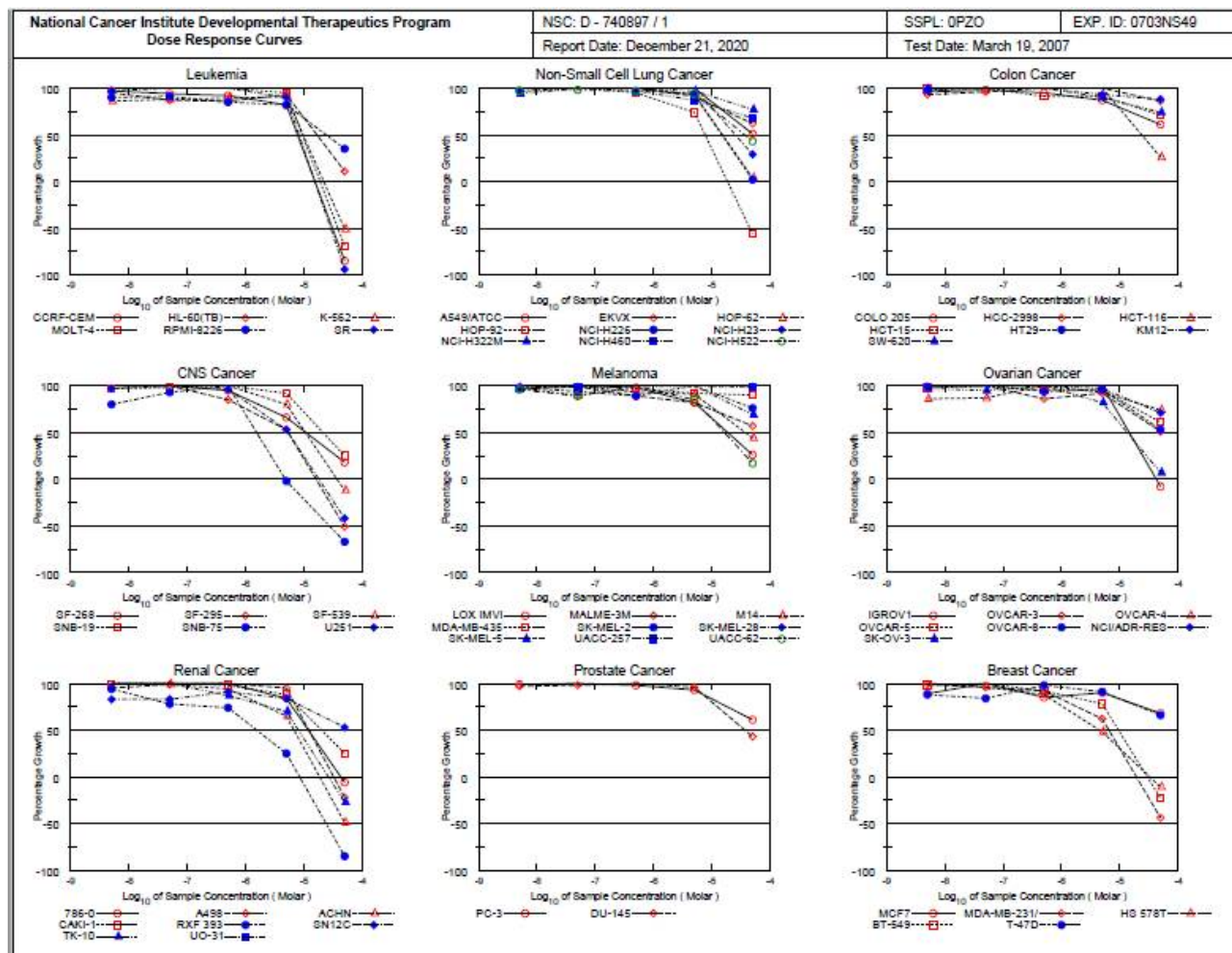
Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-{4-оксо-2-тіоксо-5-[(4Н-[1,2,4]тріазол-3-іламіно)метилєн]-тіазолідин-3-іл}-3-фенілпропанової кислоти 4.33 (10⁻⁵М)



**Протокол скринінгу протипухлинної активності 2-ціано-2-[5-[(4-метоксифеніл)метилєн]-4-оксо-3-фєнілтіазолїдин-2-їлідєн]-N-фєнілацєтамїду
4.111 (10⁻⁵M)**



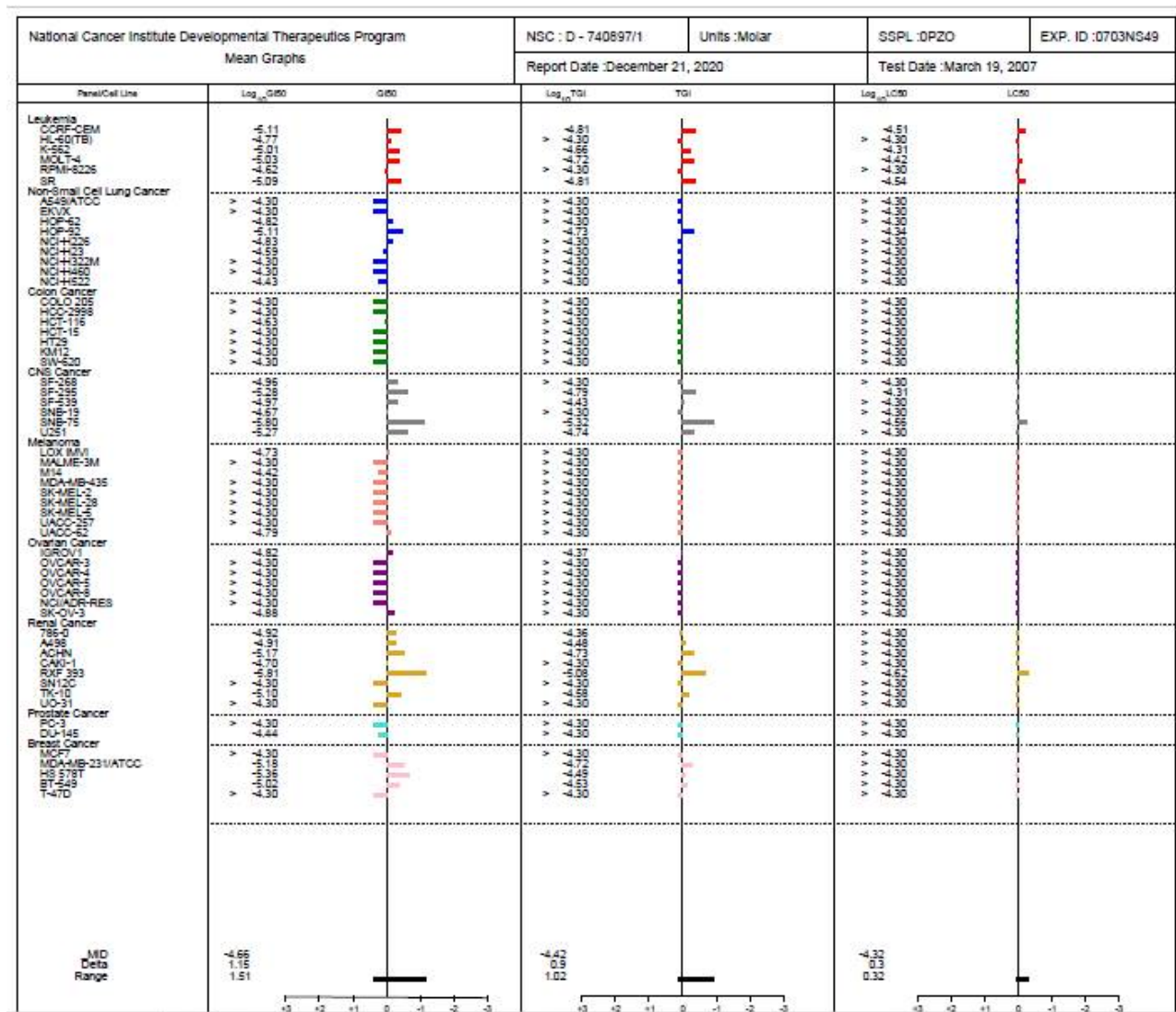
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.111 у градієнті концентрацій



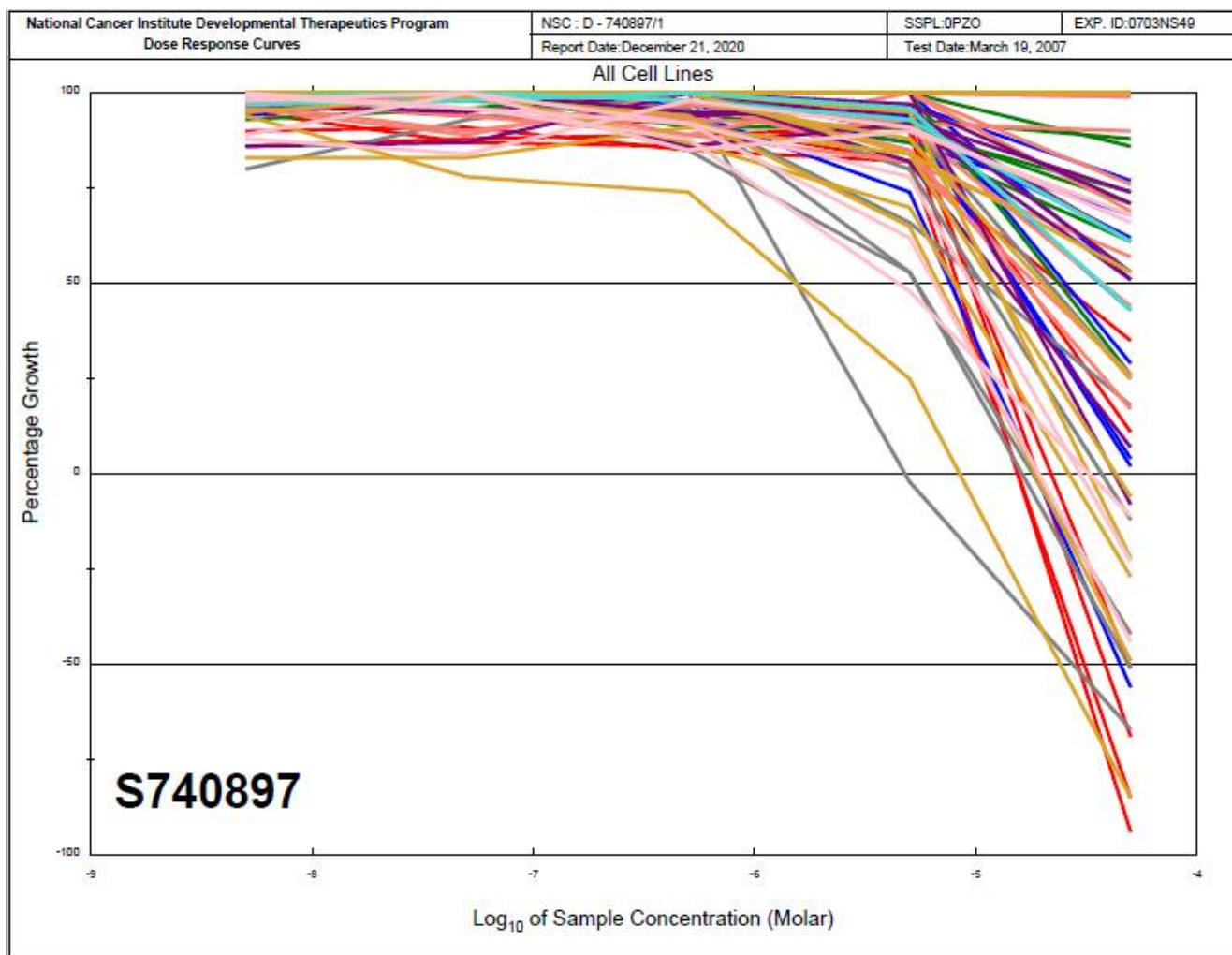
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.111 у градієнті концентрацій

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results															
NSC : D - 740897 / 1			Experiment ID : 0703N849					Test Type : 08			Units : Molar				
Report Date : December 21, 2020			Test Date : March 19, 2007					QNS :			MC :				
CCMI : Les-2453 (38993)			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related					SSPL : DP20							
Panel/Cell Line	Time		Mean Optical Densities					Percent Growth					G50	TGI	LC50
	Zero	Ctrl	-8.3	-7.3	-6.3	-5.3	-4.3	-8.3	-7.3	-6.3	-5.3	-4.3			
Leukemia															
CCRF-CEM	0.170	0.919	0.895	0.875	0.858	0.704	0.026	97	94	92	82	-85	7.70E-5	1.55E-5	3.09E-5
HL-60(TB)	0.833	2.891	2.585	2.431	2.411	2.557	0.898	95	87	85	93	11	1.60E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
K-562	0.262	1.776	1.560	1.507	1.510	1.637	0.129	86	88	89	91	-81	9.69E-5	2.18E-5	4.92E-5
MOLT-4	0.229	1.129	1.128	1.144	1.148	1.064	0.072	100	102	102	95	-59	9.42E-5	1.90E-5	3.94E-5
RPMI-6226	0.373	1.314	1.221	1.228	1.172	1.148	0.698	90	91	85	82	35	2.37E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SR	0.401	1.418	1.391	1.453	1.465	1.310	0.023	97	104	105	90	-94	5.20E-5	1.53E-5	2.67E-5
Non-Small Cell Lung Cancer															
AS46/ATCC	0.123	0.520	0.580	0.563	0.596	0.557	0.325	110	111	119	109	51	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
EOUV	0.420	1.126	1.129	1.137	1.179	1.062	0.895	100	102	108	91	82	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
HOP-62	0.803	1.700	1.779	1.789	1.896	1.622	0.646	107	108	100	93	4	1.51E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
HOP-92	0.830	1.046	1.079	1.075	1.025	0.939	0.200	106	107	95	74	-56	7.70E-5	1.87E-5	4.53E-5
NCI-H226	1.096	2.140	2.108	2.177	2.147	2.071	1.115	97	104	101	93	2	1.46E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
NCI-H23	0.482	1.593	1.589	1.746	1.640	1.628	0.800	100	114	104	103	29	2.58E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
NCI-H223M	0.503	1.886	1.804	1.724	1.685	1.630	1.412	94	105	102	97	77	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
NCI-H460	0.234	2.109	2.123	2.118	2.050	1.859	1.515	101	100	97	87	66	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
NCI-H522	1.309	3.134	3.071	3.095	3.067	3.029	2.098	97	98	97	94	43	3.68E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
Colon Cancer															
COLO 205	0.191	0.906	0.877	0.895	0.873	0.813	0.632	95	98	95	87	61	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
HCC-2998	0.439	1.232	1.175	1.200	1.277	1.257	1.121	93	95	106	103	86	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
HCT-116	0.125	1.232	1.253	1.257	1.250	1.233	0.412	102	102	102	100	28	2.37E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
HCT-15	0.389	1.905	1.889	1.904	1.759	1.772	1.467	99	100	91	91	71	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
HT29	0.195	1.054	1.034	1.075	1.079	1.120	1.109	95	103	103	108	106	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
KM12	0.334	1.426	1.433	1.466	1.474	1.347	1.290	101	107	104	93	85	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SW-620	0.178	0.894	0.885	0.896	0.918	0.821	0.708	99	100	103	90	74	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
CNS Cancer															
SF-295	0.582	2.036	2.037	2.030	1.966	1.545	0.851	100	100	95	95	18	1.08E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SF-295	0.582	1.804	1.730	1.777	1.451	1.110	0.277	112	117	85	53	-81	5.29E-5	1.81E-5	4.91E-5
SF-539	0.483	1.363	1.418	1.445	1.452	1.216	0.427	103	106	106	90	-12	1.07E-5	3.73E-5	* 5.00E-5
SNB-19	0.440	1.290	1.258	1.275	1.344	1.321	0.854	97	98	106	92	25	2.12E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SNB-75	0.491	0.870	0.838	0.857	0.874	0.481	0.163	80	93	102	-2	-57	1.58E-5	4.78E-5	2.74E-5
U251	0.179	0.797	0.778	0.824	0.775	0.506	0.104	97	104	95	53	-42	5.36E-5	1.81E-5	* 5.00E-5
Melanoma															
LOX IMVI	0.389	2.136	2.205	2.152	2.101	1.819	0.829	104	101	98	82	26	1.87E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
MALME-3M	0.825	1.493	1.463	1.468	1.395	1.340	1.122	97	99	89	82	57	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
M14	0.375	1.399	1.363	1.366	1.331	1.302	0.831	95	100	93	91	44	3.80E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
MDA-MB-435	0.473	1.899	1.856	1.755	1.854	1.702	1.758	97	90	97	92	90	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SK-MEL-2	0.726	1.883	1.862	1.827	1.582	1.738	1.454	95	94	89	105	75	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SK-MEL-28	0.255	0.835	0.877	0.706	0.887	0.699	0.630	111	119	114	114	99	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SK-MEL-5	0.429	1.313	1.363	1.454	1.451	1.459	1.038	105	115	117	118	89	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
UACC-257	0.700	1.491	1.463	1.480	1.524	1.530	1.403	97	99	104	105	99	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
UACC-62	0.636	2.187	2.109	2.002	2.193	1.932	0.894	95	89	102	85	17	1.62E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
Ovarian Cancer															
IGROV1	0.320	0.888	0.819	1.031	0.891	0.681	0.294	143	204	164	104	-8	1.51E-5	4.22E-5	* 5.00E-5
OVCA9-3	0.337	1.054	1.118	1.123	0.953	0.999	0.700	109	110	95	92	51	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
OVCA9-4	0.429	0.887	0.825	0.828	0.905	0.853	0.759	85	87	104	93	74	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
OVCA9-5	0.809	1.470	1.450	1.485	1.425	1.425	1.132	95	100	95	95	61	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
OVCA9-8	0.441	1.514	1.508	1.513	1.547	1.599	1.059	99	100	94	95	53	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
NCIADR-RES	0.585	1.752	1.759	1.836	1.820	1.711	1.406	101	107	106	97	71	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
SK-OV-3	0.513	1.155	1.136	1.125	1.196	1.037	0.581	97	95	107	82	7	1.33E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
Renal Cancer															
785-O	0.641	2.730	2.730	2.759	2.751	2.425	0.795	100	102	102	84	-5	1.20E-5	4.34E-5	* 5.00E-5
A-680	1.060	1.643	1.613	1.636	1.731	1.617	0.832	95	99	110	95	-22	1.22E-5	3.27E-5	* 5.00E-5
ACHN	0.440	1.550	1.612	1.539	1.479	1.159	0.223	106	99	94	85	-49	6.74E-5	1.85E-5	* 5.00E-5
CAKI-1	0.528	1.961	1.972	2.063	1.945	1.804	0.897	99	106	98	88	25	2.02E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
RXIF 393	0.385	0.830	0.814	0.870	0.561	0.430	0.054	94	70	74	25	-85	1.53E-5	8.37E-5	2.38E-5
SN12C	0.533	1.675	1.651	1.646	1.753	1.859	1.242	83	83	91	84	53	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
TK-10	0.497	1.306	1.322	1.311	1.156	1.060	0.365	102	101	87	70	-27	7.99E-5	2.64E-5	* 5.00E-5
UC-31	0.260	0.675	0.951	0.933	1.007	1.036	0.982	114	109	121	126	117	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
Prostate Cancer															
PC-3	0.361	1.147	1.143	1.149	1.131	1.093	0.842	99	100	98	93	61	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
DU-145	0.188	0.882	0.850	0.854	0.877	0.644	0.391	97	98	103	95	43	3.67E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
Breast Cancer															
MCF7	0.249	1.326	1.213	1.396	1.171	1.224	0.988	89	106	85	90	88	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5
MDA-MB-231/ATCC	0.444	1.025	1.016	1.000	0.975	0.807	0.248	99	95	92	82	-44	5.54E-5	1.92E-5	* 5.00E-5
HS 578T	0.435	0.931	0.942	0.910	0.869	0.672	0.308	102	95	98	88	-11	4.41E-5	3.27E-5	* 5.00E-5
BT-549	0.485	0.951	0.950	0.974	0.923	0.895	0.376	95	103	92	78	-23	9.46E-5	2.98E-5	* 5.00E-5
T-47D	0.451	0.945	0.953	0.957	0.933	0.901	0.777	85	84	98	91	85	* 5.00E-5	* 5.00E-5	* 5.00E-5

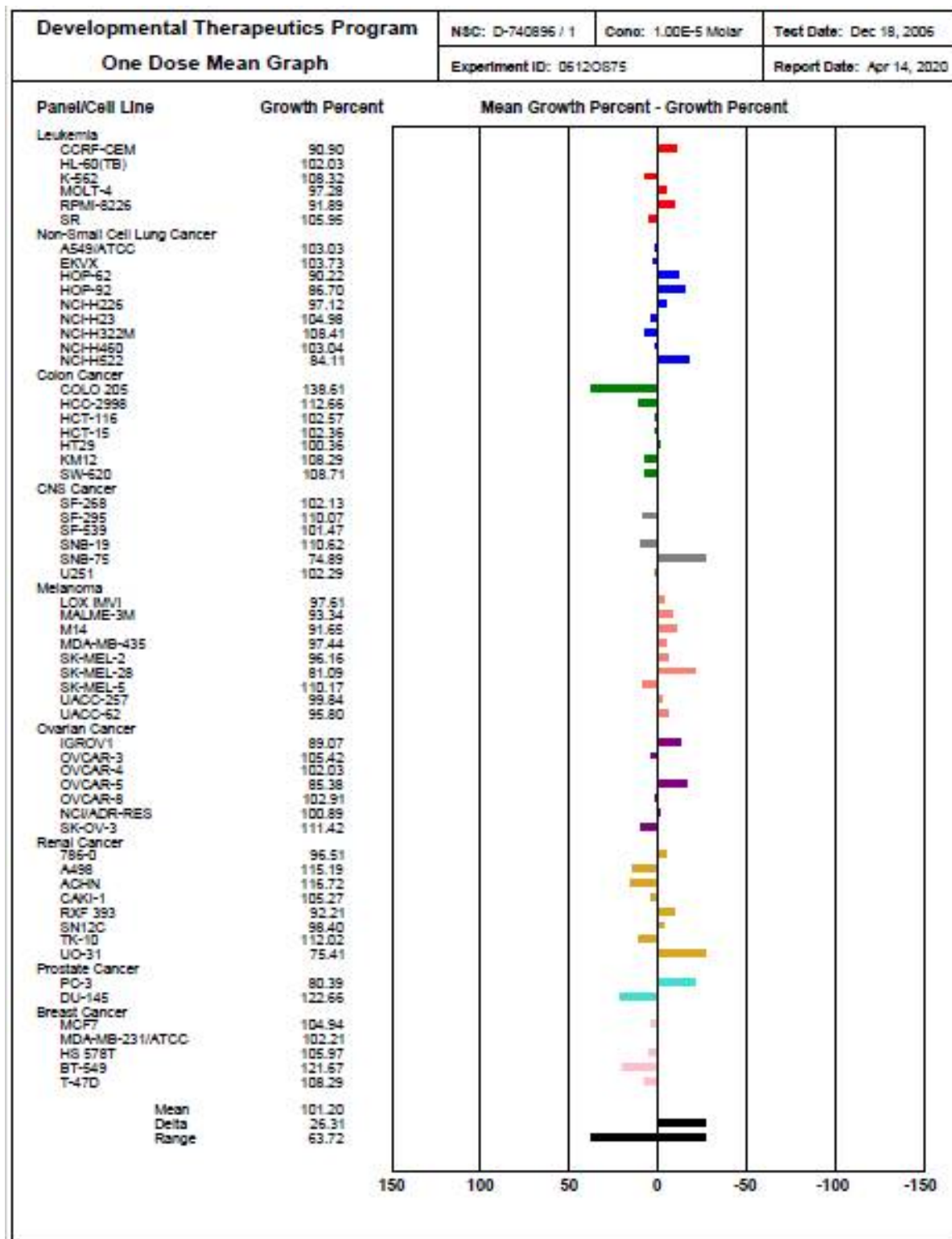
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.111 у градієнті концентрацій



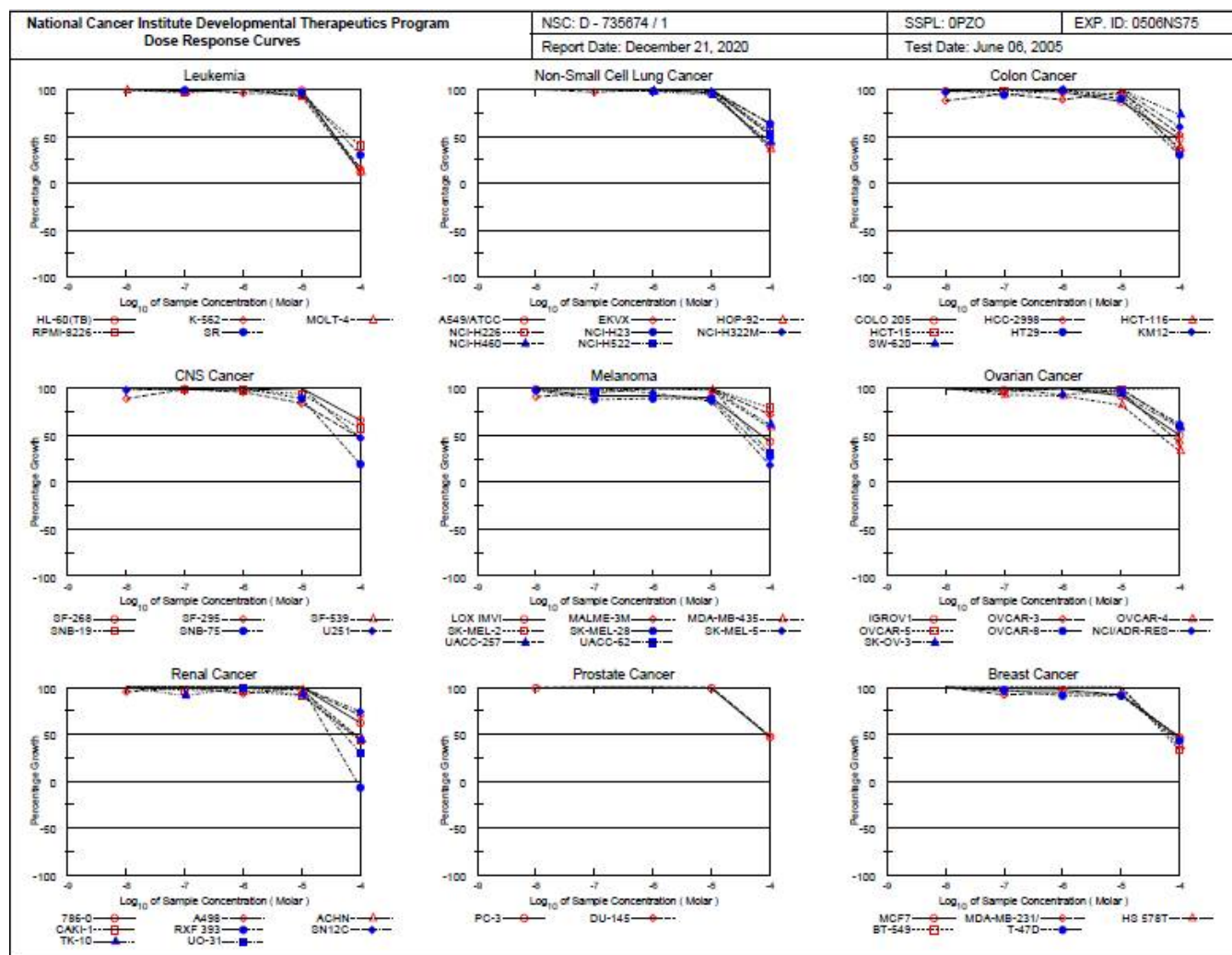
**Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 4.111 у градієнті
концентрацій**



Протокол скринінгу протипухлинної активності 2-[5-[(4-хлорофеніл)метиле]-
4-оксо-3-фенілтіазолідин-2-ілден]-2-ціано-*N*-фенілацетаміду 4.121 (10⁻⁵М)



Протокол скринінгу протипухлинної активності 9-(2-піридил)-3,7-дитіа-5-азатетрацикло[9.2.1.0^{2,10}.0^{4,8}]-тетрадецен-4(8)-ону-6 6.12 у градієнті концентрацій



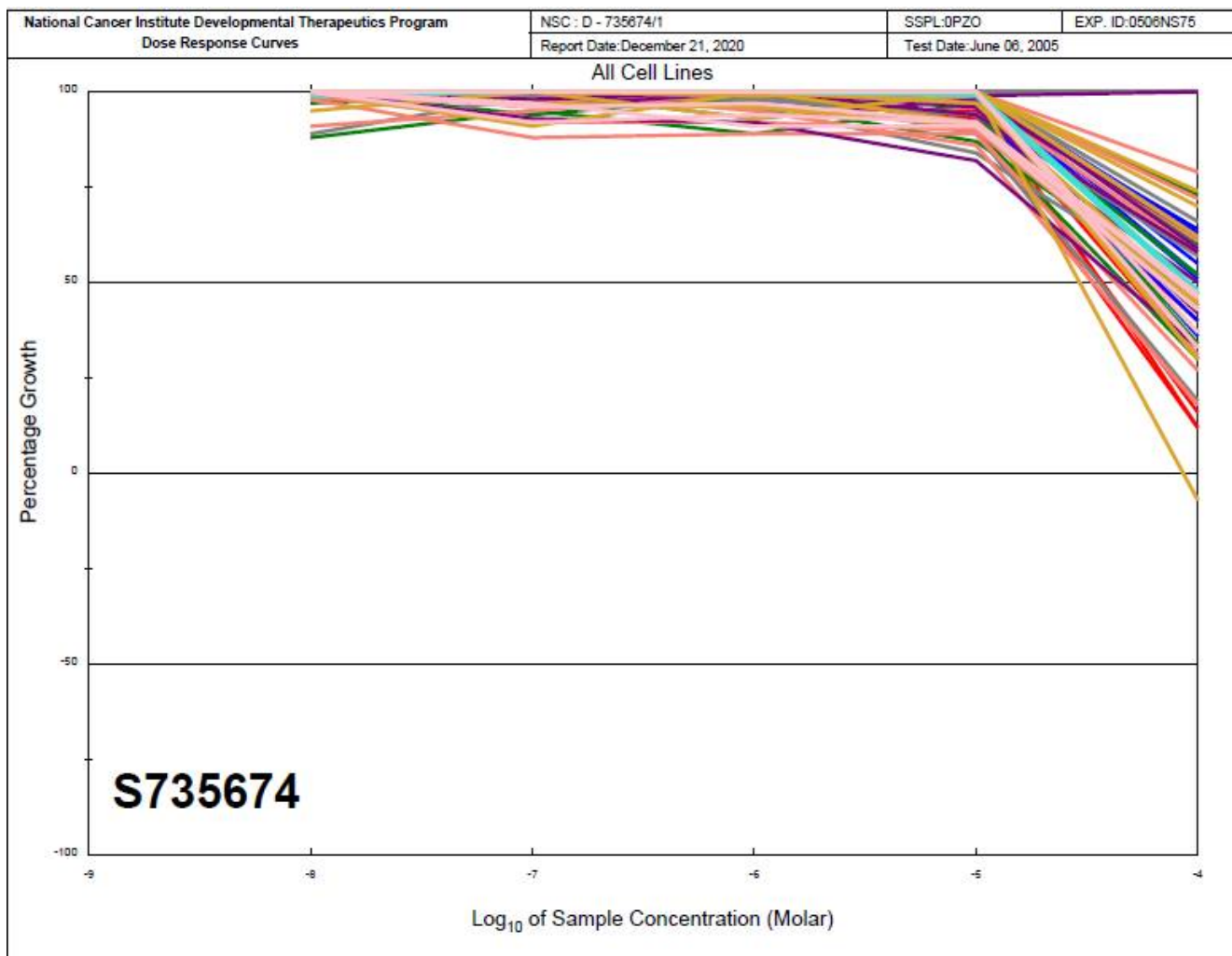
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.12

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results															
NSC : D - 735674 / 1				Experiment ID : 0506NS75				Test Type : 08				Units : Molar			
Report Date : December 21, 2020				Test Date : June 05, 2005				QNS :				MC :			
COMI : Les-2076 (35211)				Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related				SSPL : DPZO							
Panel/Cell Line	Time	Ctrl	Log10 Concentration					Percent Growth					G850	TGI	LC50
			-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0	-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0			
Leukemia															
HL-60(TB)	0.415	1.483	1.502	1.485	1.535	1.469	0.548	102	98	105	99	12	3.99E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
K-562	0.178	0.775	0.799	0.793	0.752	0.747	0.274	104	103	96	95	15	3.73E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDLT-4	0.805	2.192	2.162	2.147	2.238	2.074	0.987	99	97	103	92	12	3.31E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
RPW-4226	0.426	1.696	1.699	1.658	1.695	1.612	0.933	100	97	100	93	40	5.48E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SR	0.630	1.149	1.170	1.145	1.161	1.133	0.767	104	99	102	97	30	5.05E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Non-Small Cell Lung Cancer															
A549(ATCC)	0.208	1.154	1.218	1.203	1.154	1.119	0.502	107	105	100	98	40	5.55E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
ECVX	0.529	1.415	1.450	1.392	1.544	1.503	0.981	104	97	114	110	51	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HOP-92	0.635	0.997	1.015	1.014	0.991	1.003	0.767	105	105	98	102	35	5.18E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H226	0.594	1.436	1.455	1.438	1.551	1.444	1.058	103	100	115	101	55	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H23	0.181	1.375	1.398	1.402	1.356	1.412	0.931	102	102	98	103	83	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H226M	0.752	1.944	1.950	2.054	1.959	1.925	1.516	103	109	102	98	54	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H460	0.192	2.056	2.053	2.070	2.022	1.943	1.008	101	101	98	94	44	7.51E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H522	0.417	0.959	0.955	0.967	1.025	0.957	0.705	105	105	111	103	52	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Colon Cancer															
COLO 205	0.317	1.229	1.205	1.253	1.199	1.111	0.743	98	103	97	87	47	5.27E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HCC-2998	0.103	1.173	1.050	1.117	1.053	1.143	0.654	98	95	99	97	52	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HCT-116	0.210	1.354	1.357	1.363	1.343	1.282	0.839	103	101	99	94	37	5.02E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HCT-15	0.305	1.152	1.301	1.151	1.225	1.299	0.603	114	98	105	110	34	5.14E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HT29	0.215	0.673	0.679	0.631	0.657	0.611	0.412	101	94	99	90	30	4.61E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
KM12	0.343	1.405	1.370	1.562	1.395	1.503	0.977	97	115	99	109	90	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SW-620	0.100	0.635	0.635	0.652	0.640	0.647	0.492	100	103	101	102	73	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CNS Cancer															
SF-295	0.355	1.629	1.657	1.615	1.603	1.623	1.191	102	99	98	100	95	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SF-295	0.342	1.575	1.435	1.557	1.521	1.375	0.923	99	99	95	94	47	5.32E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SF-439	0.912	1.905	2.012	1.915	1.909	1.955	1.923	111	101	105	102	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4	
SNB-19	0.530	1.547	1.557	1.532	1.525	1.463	1.105	101	99	98	94	57	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SNB-75	0.503	0.730	0.756	0.755	0.745	0.705	0.547	112	115	105	99	15	3.65E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
U251	0.298	1.163	1.148	1.151	1.202	1.212	0.705	98	100	104	105	47	5.90E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Melanoma															
LDX IMV1	0.333	1.404	1.395	1.314	1.315	1.299	0.797	99	92	92	90	43	7.19E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MALME-3M	0.559	1.005	0.970	0.968	1.007	1.015	0.857	91	95	100	102	72	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-435	0.475	1.545	1.715	1.579	1.551	1.530	1.155	105	103	101	98	58	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-2	0.298	0.642	0.654	0.655	0.657	0.677	0.571	115	113	113	110	79	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-2B	0.560	1.000	0.991	0.947	0.954	0.954	0.690	95	90	95	89	27	4.31E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-5	0.419	1.479	1.524	1.541	1.425	1.331	0.610	114	105	95	95	15	3.35E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
UACC-257	0.527	1.220	1.301	1.254	1.240	1.345	0.950	112	109	103	118	61	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
UACC-62	0.734	1.925	1.992	1.895	1.924	1.924	1.101	105	97	100	100	31	5.25E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Ovarian Cancer															
IGROV1	0.401	1.155	1.202	1.135	1.153	1.090	0.780	105	99	100	92	50	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-3	0.355	1.305	1.353	1.254	1.301	1.257	0.759	105	95	100	95	42	7.03E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-4	0.352	0.745	0.759	0.722	0.719	0.692	0.503	103	93	92	82	33	4.55E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-5	0.212	1.051	1.124	1.151	1.123	1.059	1.138	105	109	105	99	107	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-8	0.277	0.990	1.045	1.034	1.029	0.991	0.700	105	105	105	100	59	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCIADR-RES	0.157	1.255	1.311	1.275	1.157	1.233	0.849	105	102	93	98	82	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-OV-3	0.537	1.237	1.252	1.315	1.331	1.195	0.942	105	111	113	94	55	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Renal Cancer															
785-0	0.304	1.905	1.951	1.942	1.930	2.015	1.302	103	102	101	107	82	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
A-498	0.773	1.093	1.075	1.107	1.070	1.121	0.995	95	105	93	109	70	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
ACHN	0.328	1.122	1.175	1.121	1.154	1.102	0.693	107	100	100	97	45	7.94E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CAH-1	0.425	1.545	1.550	1.505	1.790	1.717	1.039	103	97	95	91	43	7.17E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
RJF 393	0.514	0.723	0.835	0.773	0.725	0.749	0.479	154	124	102	112	-7	3.33E-5	5.75E-5	> 1.00E-4
SN12C	0.411	1.099	1.153	1.102	1.137	1.115	0.922	109	100	105	102	74	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4
TK-10	0.525	1.527	1.552	1.447	1.532	1.450	1.025	114	91	101	92	44	7.61E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
UC-31	0.493	1.295	1.353	1.329	1.275	1.295	0.735	109	105	99	101	30	5.30E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Prostate Cancer															
PC-3	0.211	0.751	0.754	0.771	0.759	0.755	0.470	99	102	100	99	47	5.75E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
DU-145	0.354	1.373	1.441	1.411	1.422	1.305	0.853	107	104	105	101	45	9.32E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Breast Cancer															
MC77	0.109	1.501	1.510	1.451	1.452	1.391	0.753	101	95	97	92	45	5.29E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-231(ATCC)	0.509	1.052	1.093	1.020	1.025	1.021	0.755	105	92	94	92	47	5.45E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HIS 575T	0.559	1.059	1.175	1.175	1.191	1.147	0.635	122	122	125	115	37	5.71E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
BT-549	0.532	1.175	1.199	1.211	1.224	1.175	0.744	104	105	100	100	33	5.57E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
T-47D	0.355	0.577	0.553	0.552	0.534	0.532	0.555	101	97	91	91	43	7.11E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4

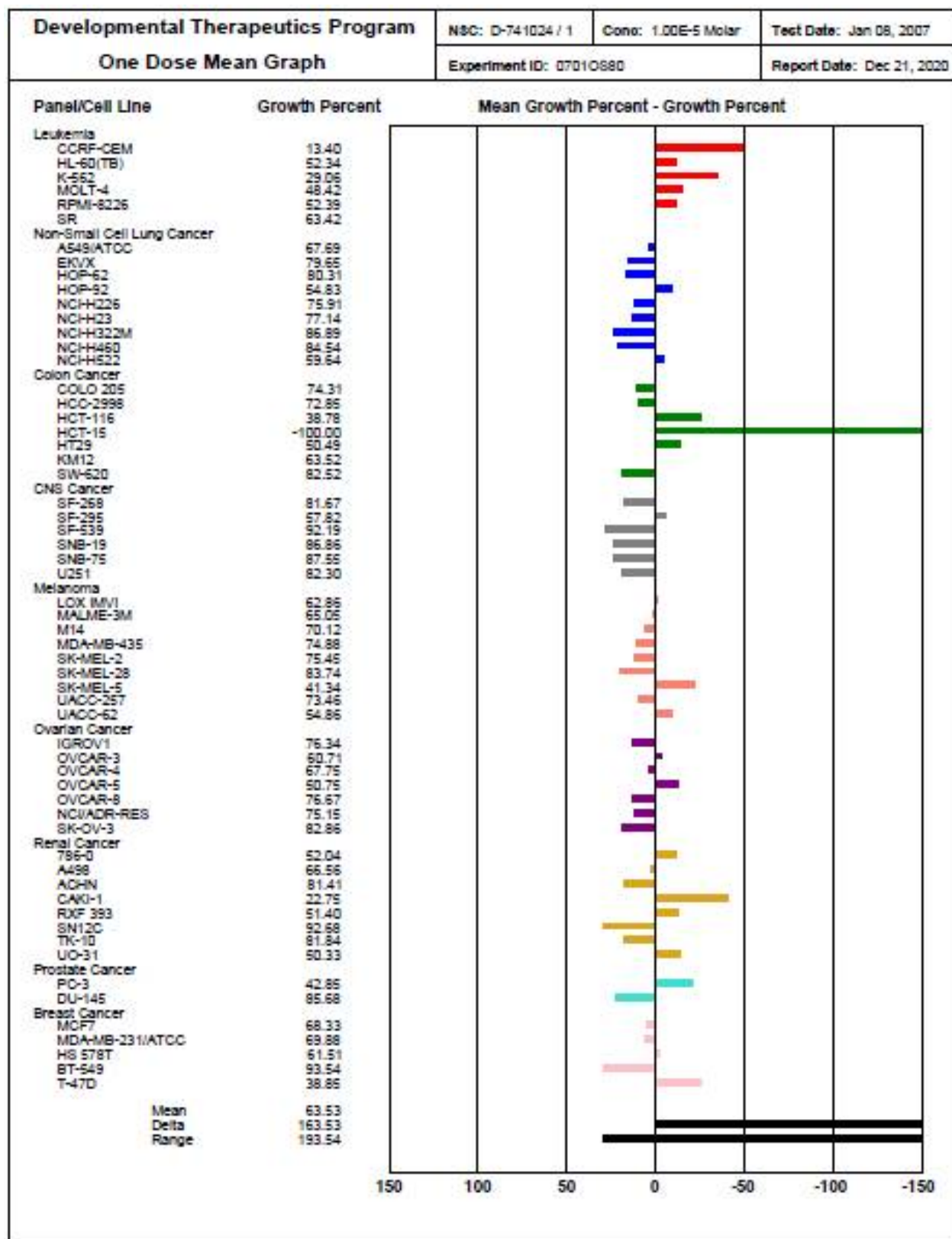
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.12

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program		NSC : D - 735674/1	Units :Molar	SSPL :0P20	EXP. ID :0506NS75	
Mean Graphs		Report Date :December 21, 2020		Test Date :June 06, 2005		
Panel/Cell Line	Log ₁₀ GI50	GI50	Log ₁₀ TGI	TGI	Log ₁₀ LC50	LC50
Leukemia						
HL-60(TB)	4.44		4.44		4.44	
K-562	4.43		4.43		4.43	
MOLT-4	4.48		4.48		4.48	
RPMI-8226	4.19		4.19		4.19	
SR	4.30		4.30		4.30	
Non-Small Cell Lung Cancer						
A549(ATOC)	4.18		4.18		4.18	
BEKX	4.00		4.00		4.00	
HOP-92	4.44		4.44		4.44	
NCI-H226	4.00		4.00		4.00	
NCI-H323	4.00		4.00		4.00	
NCI-H323M	4.00		4.00		4.00	
NCI-H460	4.18		4.18		4.18	
NCI-H522	4.00		4.00		4.00	
Colon Cancer						
COLO 205	4.08		4.08		4.08	
HCC-2998	4.44		4.44		4.44	
HCT-116	4.14		4.14		4.14	
HCT-15	4.14		4.14		4.14	
HT29	4.00		4.00		4.00	
KM12	4.00		4.00		4.00	
SW-620	4.00		4.00		4.00	
CNS Cancer						
SP-268	4.00		4.00		4.00	
SP-295	4.00		4.00		4.00	
SP-38	4.00		4.00		4.00	
SNB-19	4.00		4.00		4.00	
SNB-75	4.00		4.00		4.00	
U251	4.00		4.00		4.00	
Melanoma						
LOX IMVI	4.14		4.14		4.14	
MALME-3M	4.00		4.00		4.00	
MDA-MB-435	4.00		4.00		4.00	
SK-MEL-2	4.00		4.00		4.00	
SK-MEL-28	4.00		4.00		4.00	
SK-MEL-29	4.00		4.00		4.00	
SK-MEL-35	4.00		4.00		4.00	
UACC-257	4.00		4.00		4.00	
UACC-62	4.00		4.00		4.00	
Ovarian Cancer						
IGROV1	4.00		4.00		4.00	
OVCAR-3	4.15		4.15		4.15	
OVCAR-4	4.00		4.00		4.00	
OVCAR-5	4.00		4.00		4.00	
OVCAR-6	4.00		4.00		4.00	
NCI/ADR-RES	4.00		4.00		4.00	
SK-OV-3	4.00		4.00		4.00	
Renal Cancer						
786-O	4.00		4.00		4.00	
A498	4.00		4.00		4.00	
ACHN	4.10		4.10		4.10	
CAK1	4.14		4.14		4.14	
RFX 393	4.00		4.00		4.00	
SN12C	4.00		4.00		4.00	
TK-10	4.13		4.13		4.13	
UO-31	4.00		4.00		4.00	
Prostate Cancer						
PC-3	4.06		4.06		4.06	
DU-145	4.03		4.03		4.03	
Breast Cancer						
MCF7	4.08		4.08		4.08	
MDA-MB-231(ATOC)	4.07		4.07		4.07	
HS 578T	4.17		4.17		4.17	
BT-20	4.18		4.18		4.18	
T-47D	4.18		4.18		4.18	
MD Delta Range	4.13 0.38 0.48		4.0 0.06 0.06		4.0 0.06 0.06	

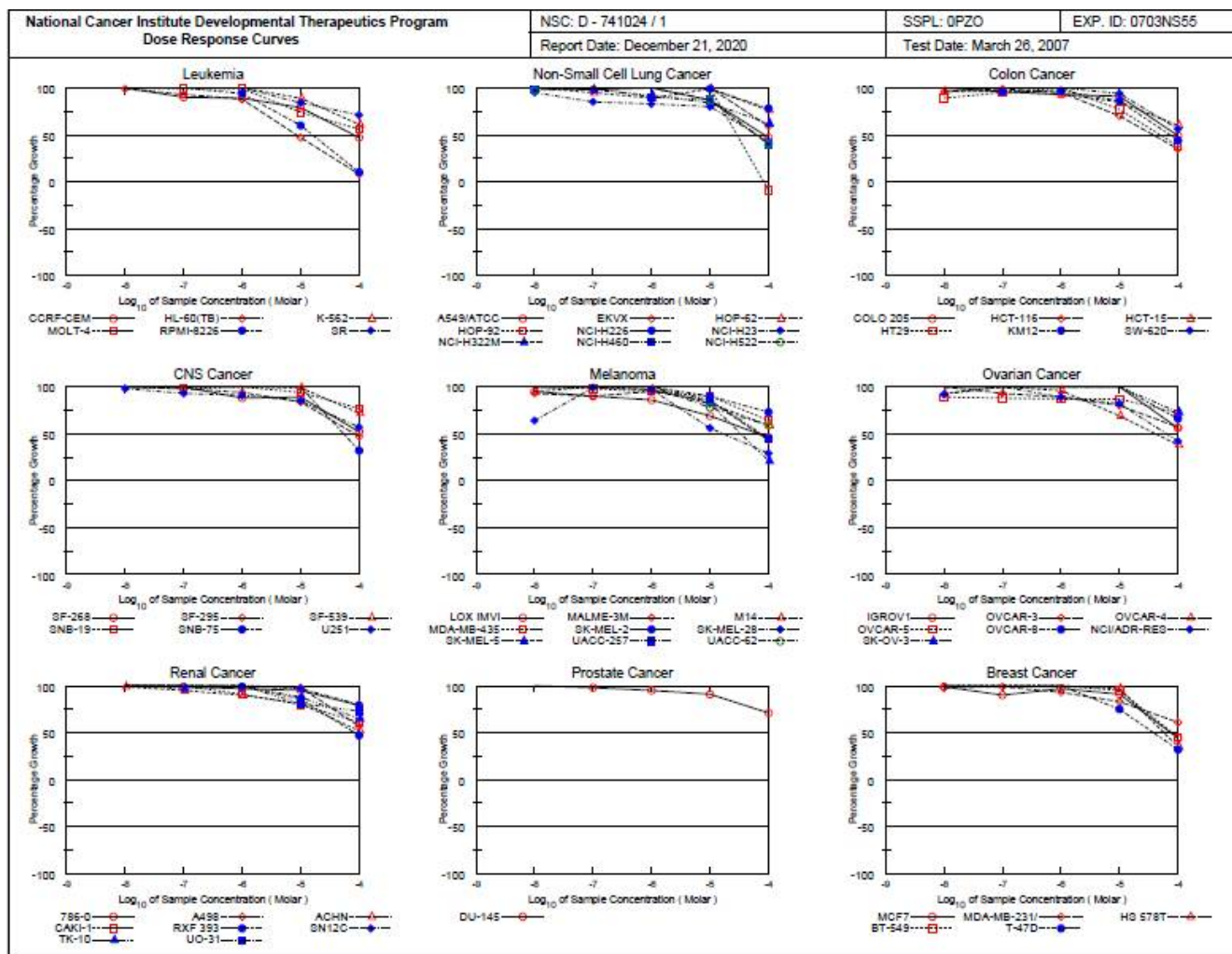
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.12



Протокол скринінгу протипухлинної активності етилового естеру 2-(9-(4'-хлорофеніл)-3,7-дитіа-5-азатетрацикло-[9,2,1,0^{2,10},0^{4,8}]-тетрадецен-4(8)-он-6-іл-5)-ацетатної кислоти 6.31 (10⁻⁵M)



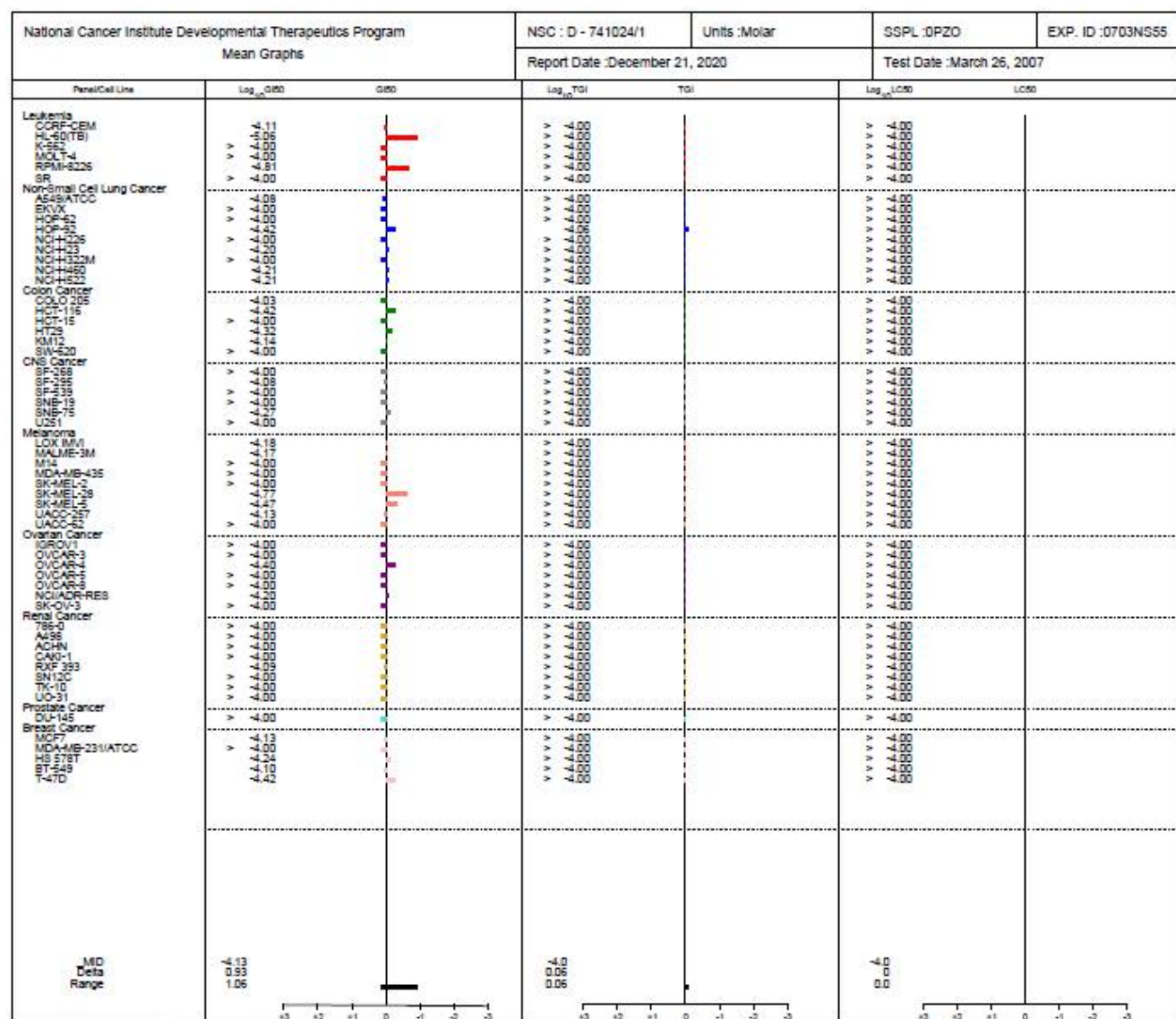
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.31 у градієнті концентрацій



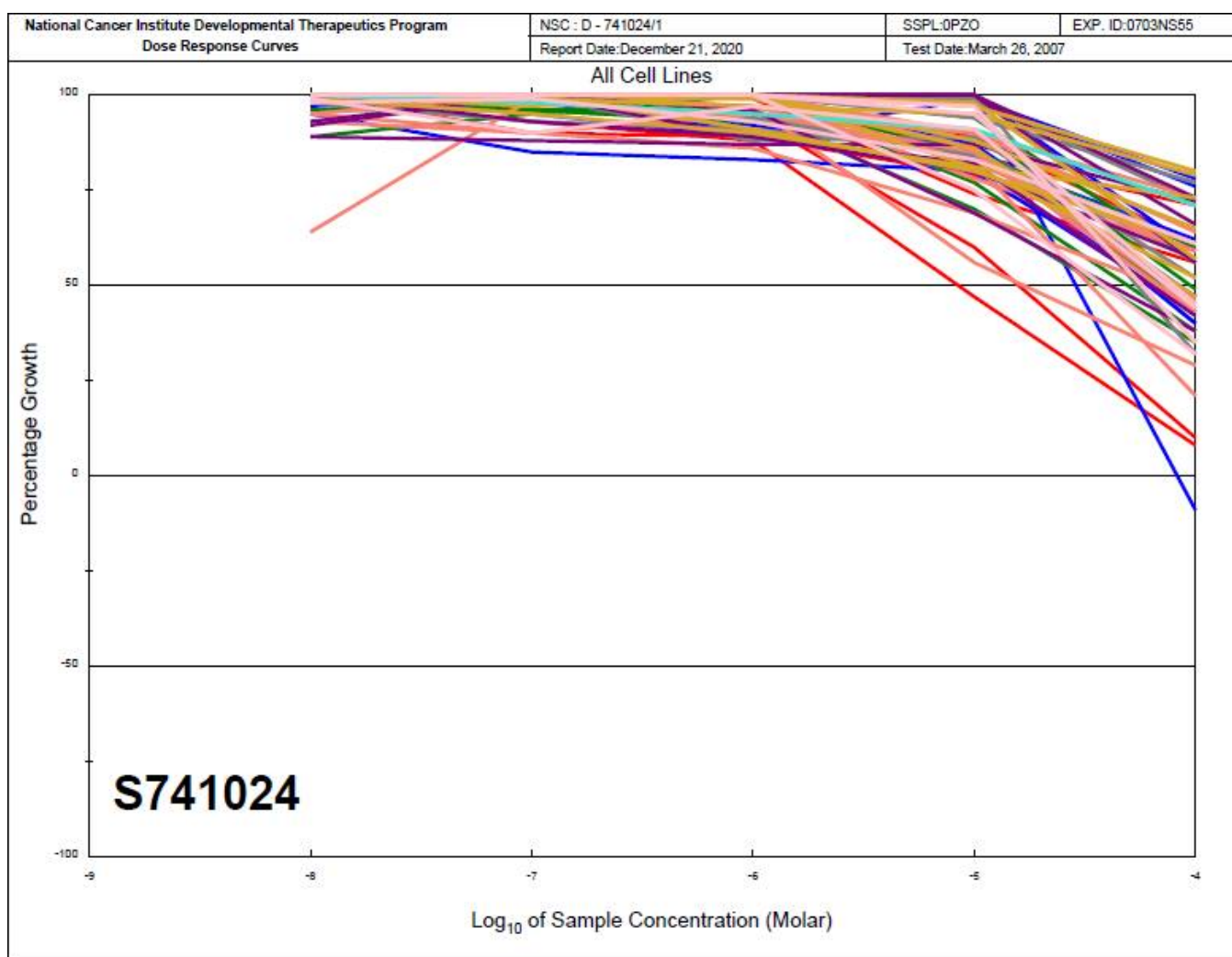
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.31

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results														
NSC : D - 741024 / 1			Experiment ID : 0703NS55					Test Type : 08			Units : Molar			
Report Date : December 21, 2020			Test Date : March 26, 2007					QNS :			MC :			
COMI : Les-2251 (41297)			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related					SSPL : DPZO						
Panel/Cell Line	Time	Log10 Concentration					Percent Growth					GI50	TGI	LC50
		Zero	Ctrl	-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0	-3.0	-2.0	-1.0			
Leukemia														
CCRF-CEM	0.144	0.888	0.888	0.808	0.800	0.548	0.363	100	90	89	79	47	7.82E-5	> 1.00E-4
HL-60(TB)	0.355	1.835	1.818	1.736	1.656	1.058	0.472	99	93	88	47	8	5.88E-5	> 1.00E-4
K-562	0.096	0.707	0.724	0.719	0.757	0.642	0.468	103	102	106	89	81	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MOLT-4	0.204	0.894	0.921	0.884	0.889	0.712	0.589	104	99	99	74	56	> 1.00E-4	> 1.00E-4
RFM-4226	0.275	0.873	0.883	0.871	0.881	0.812	0.314	102	100	94	60	10	1.96E-5	> 1.00E-4
SR	0.142	0.444	0.524	0.462	0.448	0.398	0.396	127	106	100	84	71	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Non-Small Cell Lung Cancer														
A549(ATCC)	0.209	1.489	1.520	1.485	1.505	1.326	0.809	102	98	101	87	47	8.36E-5	> 1.00E-4
EKVX	0.482	1.223	1.295	1.305	1.287	1.240	0.907	109	111	106	102	59	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HOP-62	0.888	1.891	1.904	1.831	1.782	1.682	1.586	101	95	89	99	75	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HOP-92	0.535	0.847	0.887	0.867	0.714	0.681	0.490	118	110	181	131	-9	3.81E-5	8.89E-5
NCI-H226	1.028	2.312	2.384	2.435	2.433	2.302	2.024	106	110	109	99	78	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H23	0.240	0.827	0.799	0.737	0.728	0.708	0.490	95	85	83	60	43	6.31E-5	> 1.00E-4
NCI-H322M	0.248	0.809	0.818	0.799	0.785	0.719	0.595	102	98	92	84	82	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H460	0.183	1.409	1.387	1.425	1.282	1.250	0.873	96	101	90	87	40	6.12E-5	> 1.00E-4
NCI-H822	0.312	1.115	1.087	1.142	1.147	1.012	0.635	97	103	104	87	40	6.20E-5	> 1.00E-4
Colon Cancer														
COLO 205	0.260	1.195	1.215	1.154	1.133	1.114	0.715	102	96	93	91	49	9.29E-5	> 1.00E-4
HCT-116	0.132	1.178	1.132	1.188	1.125	0.889	0.488	96	99	95	70	35	3.77E-5	> 1.00E-4
HCT-15	0.258	1.806	1.557	1.546	1.516	1.410	1.060	96	95	93	85	80	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HT29	0.144	0.848	0.773	0.815	0.854	0.883	0.469	89	95	101	77	38	4.81E-5	> 1.00E-4
KM12	0.273	1.388	1.373	1.319	1.340	1.220	0.758	100	95	97	88	44	7.31E-5	> 1.00E-4
SW-620	0.183	0.893	0.948	0.940	0.895	0.890	0.573	106	107	100	94	56	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CNS Cancer														
SF-268	0.397	1.356	1.378	1.356	1.242	1.249	0.900	102	100	86	89	52	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SF-295	0.577	1.783	1.754	1.736	1.697	1.575	1.133	100	98	94	84	47	8.28E-5	> 1.00E-4
SF-839	0.525	1.454	1.583	1.531	1.464	1.446	1.192	112	108	101	99	72	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SNB-19	0.822	1.391	1.401	1.375	1.391	1.347	1.215	101	98	100	94	77	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SNB-75	0.871	1.117	1.136	1.180	1.132	1.119	0.813	104	110	103	101	32	5.43E-5	> 1.00E-4
U251	0.301	1.342	1.319	1.288	1.254	1.191	0.895	96	93	91	85	57	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Melanoma														
LOX IMVI	0.349	2.351	2.252	2.149	2.077	1.730	1.266	95	90	86	69	46	5.58E-5	> 1.00E-4
MALME-3M	0.418	1.118	1.085	1.045	1.084	1.016	0.718	93	90	95	85	43	5.80E-5	> 1.00E-4
M14	0.279	1.087	1.028	1.069	1.042	0.924	0.748	95	100	97	82	59	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-435	0.380	1.640	1.648	1.614	1.574	1.513	1.174	101	98	95	90	84	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-2	0.495	1.440	1.505	1.463	1.490	1.350	1.187	107	105	105	90	73	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-28	0.220	0.884	0.926	0.888	0.848	0.471	0.347	84	99	97	88	29	1.71E-5	> 1.00E-4
SK-MEL-5	0.388	1.614	1.793	1.727	1.713	1.391	0.834	114	109	108	82	21	3.37E-5	> 1.00E-4
UACC-257	0.323	0.971	0.985	1.051	1.000	0.880	0.613	102	112	104	88	45	7.47E-5	> 1.00E-4
UACC-62	0.618	2.243	2.314	2.354	2.277	1.887	1.573	104	107	102	78	59	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Ovarian Cancer														
IGROV1	0.174	0.590	0.639	0.653	0.615	0.670	0.407	112	115	106	119	58	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCA9-3	0.394	1.230	1.234	1.175	1.139	1.096	0.867	100	93	89	80	57	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCA9-4	0.544	1.189	1.146	1.195	1.183	0.988	0.787	93	101	96	69	38	4.01E-5	> 1.00E-4
OVCA9-5	0.322	1.007	0.933	0.924	0.918	0.915	0.813	89	88	87	87	72	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCA9-8	0.144	0.840	0.885	0.867	0.895	0.872	0.600	104	108	108	105	98	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCIADR-RES	0.257	0.758	0.717	0.758	0.701	0.696	0.496	92	100	89	82	42	6.25E-5	> 1.00E-4
SK-OV-3	0.368	0.901	0.918	0.917	0.917	0.899	0.757	103	103	103	100	73	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Renal Cancer														
786-O	1.067	3.062	3.071	3.035	3.005	2.956	2.636	100	99	97	96	79	> 1.00E-4	> 1.00E-4
A-68	0.764	1.536	1.585	1.590	1.578	1.524	1.210	107	107	105	98	57	> 1.00E-4	> 1.00E-4
ACHN	0.482	1.674	1.657	1.617	1.549	1.434	1.060	99	95	90	81	52	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CAKI-1	0.474	1.808	1.819	1.820	1.864	1.544	1.288	101	101	91	80	61	> 1.00E-4	> 1.00E-4
RJRT-293	0.280	0.842	0.849	0.862	0.839	0.889	0.438	102	105	99	85	47	8.20E-5	> 1.00E-4
SN12C	0.412	1.610	1.613	1.654	1.662	1.589	1.368	100	104	104	97	80	> 1.00E-4	> 1.00E-4
TK-10	0.293	0.948	0.953	0.925	0.975	0.887	0.717	101	97	104	88	85	> 1.00E-4	> 1.00E-4
UC-31	0.364	1.437	1.467	1.457	1.442	1.240	1.148	103	102	101	81	73	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Prostate Cancer														
DU-145	0.324	1.247	1.247	1.225	1.200	1.181	0.977	100	98	95	91	71	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Breast Cancer														
MCF7	0.238	1.154	1.176	1.094	1.155	1.098	0.853	99	90	97	91	44	7.41E-5	> 1.00E-4
MDA-MB-231(ATCC)	0.475	1.155	1.139	1.147	1.108	1.041	0.807	98	99	93	83	61	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HS 578T	0.397	0.715	0.784	0.742	0.719	0.704	0.508	116	109	101	97	35	5.71E-5	> 1.00E-4
BT-549	0.430	0.790	0.803	0.813	0.811	0.772	0.593	104	105	106	95	45	6.02E-5	> 1.00E-4
T-47D	0.527	1.160	1.205	1.225	1.179	1.014	0.737	104	107	100	75	32	3.79E-5	> 1.00E-4

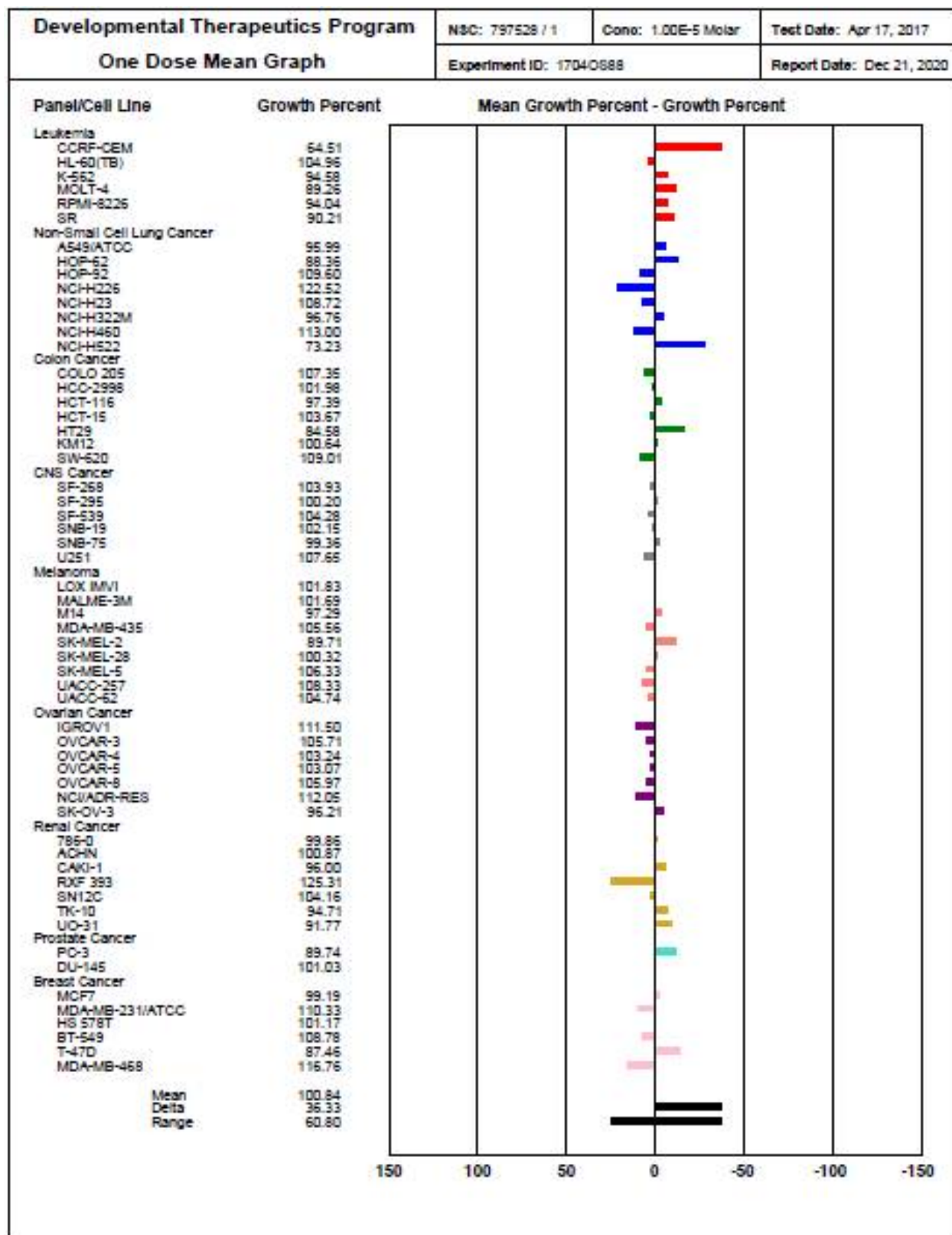
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.31



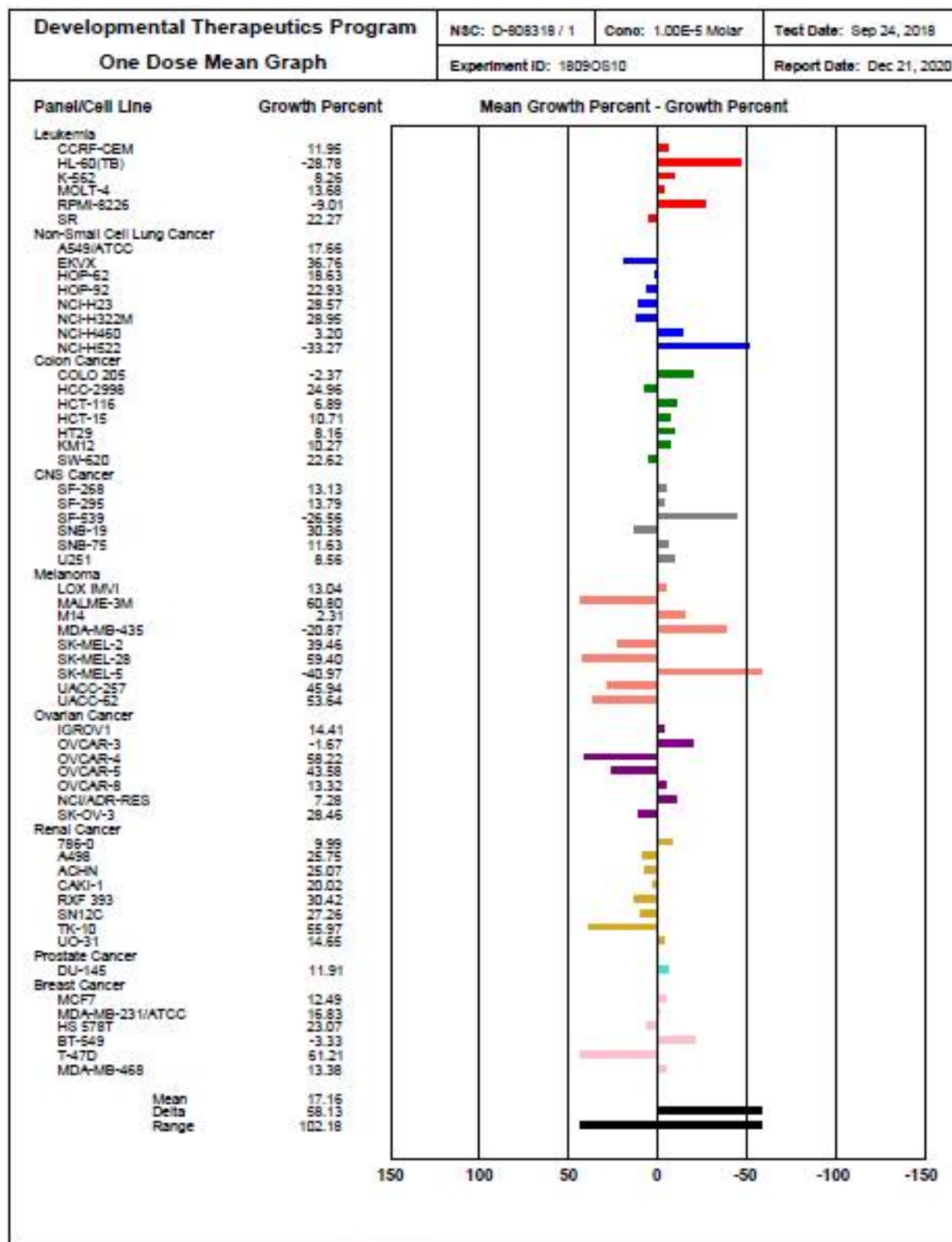
Протокол скринінгу протипухлинної активності сполуки 6.31



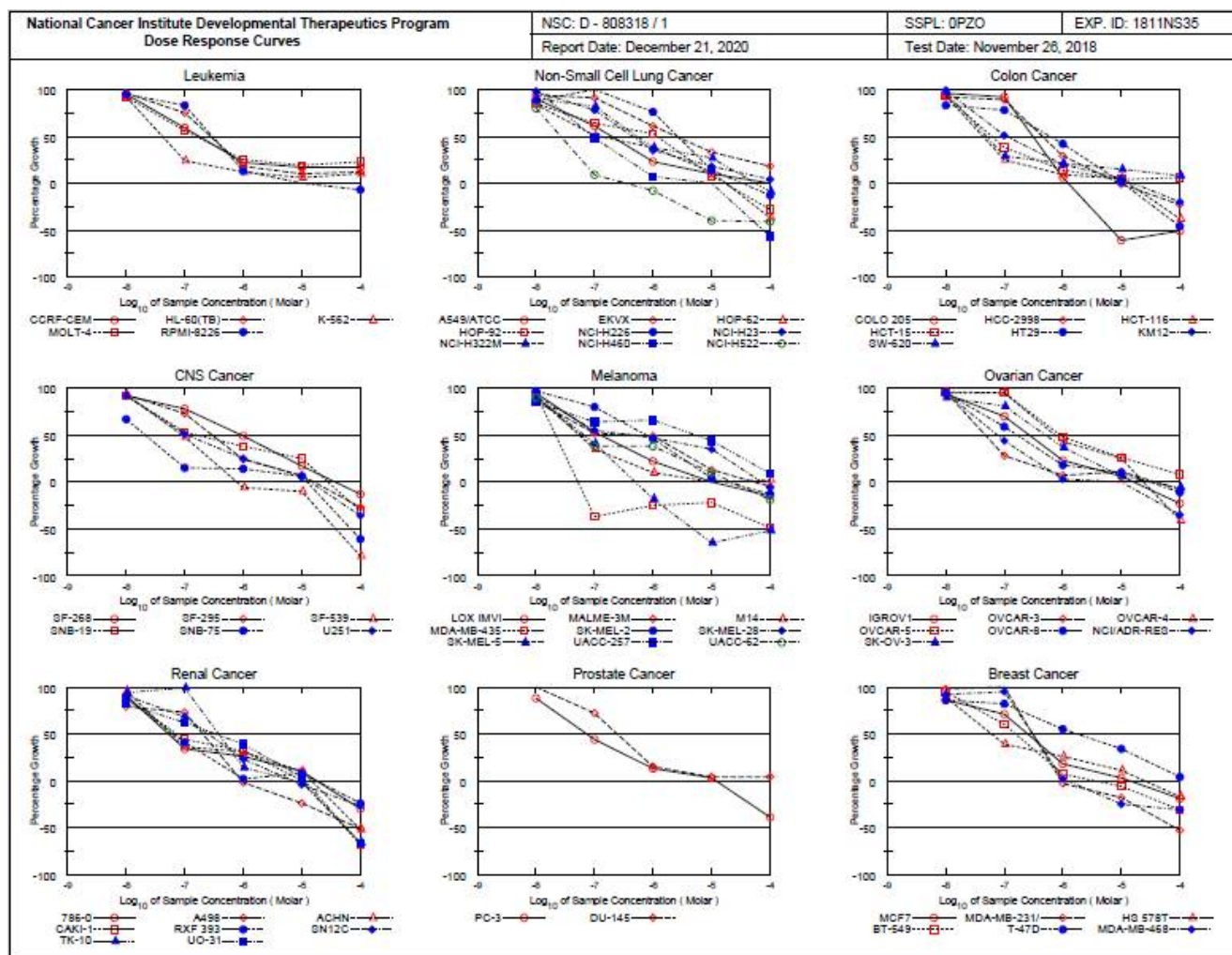
Протокол скринінгу протипухлинної активності 5-метил-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5-іліденметил)-1Н-індол-2-карбонової кислоти 6.46 (10^{-5}M)



**Протокол скринінгу протипухлинної активності метилового естеру
5-флюоро-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5-іліденметил)-1Н-індол-2-карбонової
кислоти 6.47 (10⁻⁵М)**



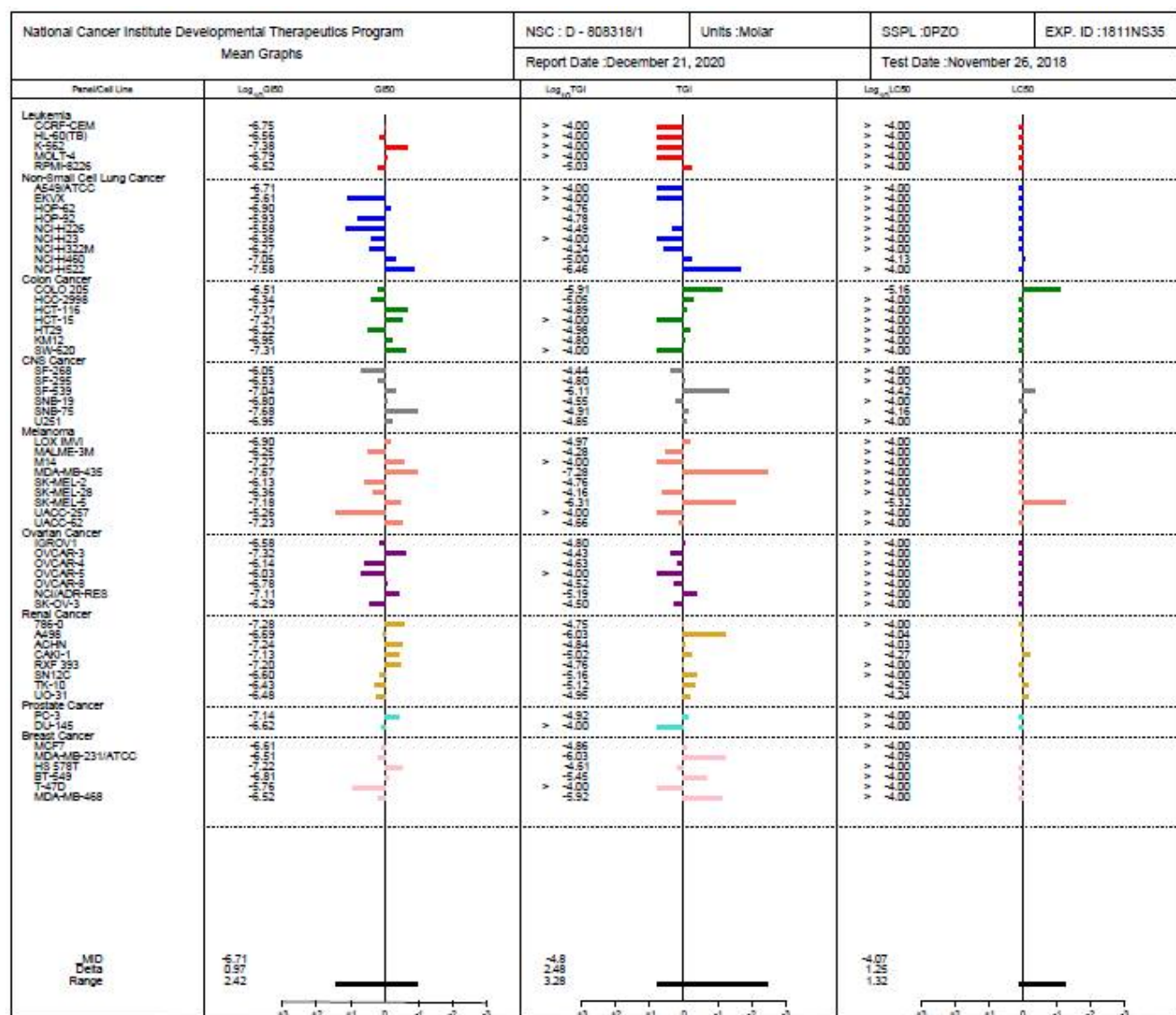
Протокол скринінгу (№1) протипухлинної активності сполуки 6.47 у градієнті концентрацій



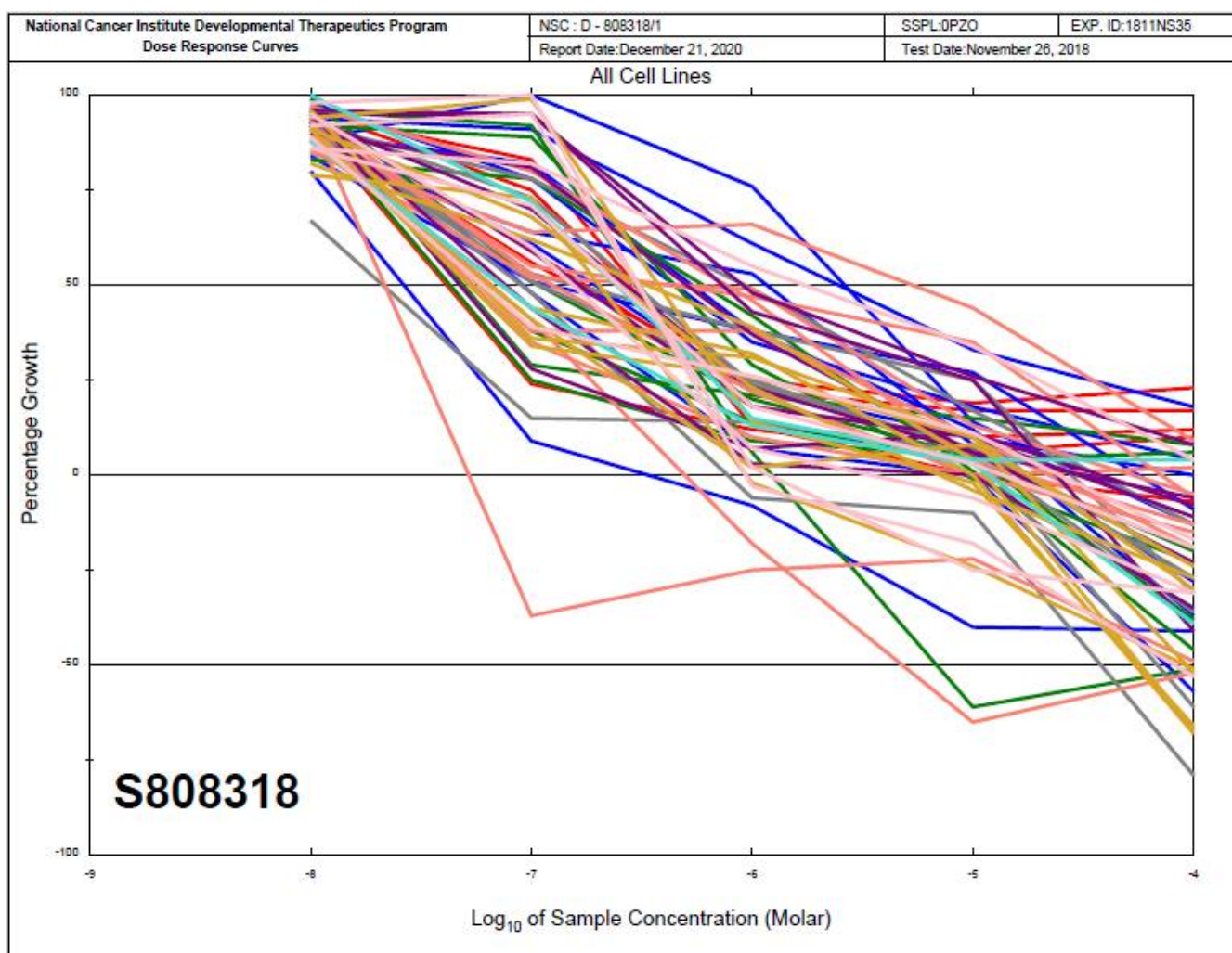
Протокол скринінгу (№1) протипухлинної активності сполуки 6.47

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results															
NSC : D - 808318 / 1			Experiment ID : 1811NS35					Test Type : 08			Units : Molar				
Report Date : December 21, 2020			Test Date : November 26, 2018					QNS :			MC :				
COMI : Les-6009			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related					SSPL : DF20							
Panel/Cell Line	Time	Ctrl	Log10 Concentration					Percent Growth					GI50	TGI	LC50
			Mean Optical Densities	-6.0	-7.0	-8.0	-9.0	-6.0	-7.0	-8.0	-9.0				
Leukemia															
CCRF-CEM	0.123	2.341	2.232	1.437	0.819	0.510	0.498	95	59	22	17	17	1.78E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
HL-60(TB)	0.091	3.378	3.248	2.550	0.897	0.425	0.492	96	75	18	10	12	2.75E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
K-562	0.116	2.411	2.230	0.861	0.362	0.264	0.342	92	24	12	6	10	4.13E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
MOLT-4	0.291	2.623	2.427	1.807	0.885	0.725	0.626	92	56	25	19	23	1.61E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
RPMI-8226	0.806	2.509	2.415	2.191	0.861	0.604	0.585	95	83	13		-7	2.99E-7	9.33E-6	* 1.00E-4
Non-Small Cell Lung Cancer															
A549/ATCC	0.261	2.024	1.863	1.374	0.739	0.511	0.361	90	61	23	10		1.97E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
ERVK	1.172	2.644	2.742	2.695	2.196	1.718	1.472	94	91	61	33	15	2.47E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
HOP-62	0.653	2.066	1.853	1.369	1.201	0.820	0.412	94	51	30	12	-37	1.27E-7	1.73E-5	* 1.00E-4
HOP-92	0.736	1.426	1.321	1.177	1.103	0.769	0.534	85	64	53	8	-28	1.16E-6	1.65E-5	* 1.00E-4
NCI-H226	0.940	2.151	2.009	2.155	1.880	1.106	0.816	88	100	76	14	-13	2.61E-6	3.23E-5	* 1.00E-4
NCI-H23	0.622	2.060	2.052	1.757	1.132	0.890	0.676	96	78	35	18	4	4.46E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
NCI-H322M	0.715	1.994	1.871	1.763	1.205	1.055	0.854	90	82	38	27	-9	5.40E-7	5.72E-5	* 1.00E-4
NCI-H460	0.225	2.577	2.608	1.344	0.379	0.229	0.096	101	40	7		-57	9.01E-6	1.01E-5	7.46E-5
NCI-H522	0.687	1.746	1.536	0.781	0.636	0.415	0.408	80	9	-8	-40	-41	2.66E-6	3.44E-7	* 1.00E-4
Colon Cancer															
COLO 205	0.380	1.712	1.652	1.612	0.465	0.150	0.167	96	92	6	-61	-61	3.11E-7	1.24E-6	6.96E-6
HCC-T98H	1.260	3.094	2.941	2.900	1.796	1.242	0.965	92	89	29	-1	-23	4.53E-7	6.96E-6	* 1.00E-4
HCT-116	0.103	1.177	1.103	0.373	0.196	0.152	0.064	93	25	9	5	-36	4.31E-6	1.27E-5	* 1.00E-4
HCT-115	0.330	2.545	2.392	1.162	0.645	0.426	0.465	93	38	14	4	6	6.15E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
HT29	0.701	1.612	1.455	1.410	1.085	0.709	0.380	83	78	42	1	-46	6.03E-7	1.04E-5	* 1.00E-4
KM12	0.615	3.090	3.077	1.669	1.113	0.735	0.463	99	51	20	5	-20	1.11E-7	1.57E-5	* 1.00E-4
SW620	0.252	2.112	2.063	0.765	0.639	0.530	0.407	97	29	21	15	6	4.69E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
CNS Cancer															
SF-265	1.047	2.963	2.825	2.553	1.969	1.371	0.912	92	78	49	17	-13	8.90E-7	3.66E-5	* 1.00E-4
SF-295	0.642	2.976	2.826	2.401	1.380	0.906	0.613	93	73	24	7	-27	2.97E-7	1.56E-5	* 1.00E-4
SF-839	0.624	2.646	2.714	1.794	0.778	0.742	0.174	93	48	-6	-10	-79	9.03E-6	7.65E-7	3.81E-5
SNB-19	0.652	2.236	2.115	1.464	1.246	1.045	0.463	92	53	38	26	-31	1.60E-7	2.80E-5	* 1.00E-4
SNB-75	1.143	1.950	1.683	1.261	1.256	1.194	0.449	87	15	14	8	-61	2.11E-6	1.24E-5	6.91E-5
U251	0.430	1.996	1.868	1.236	0.617	0.529	0.275	92	51	25	6	-36	1.13E-7	1.41E-5	* 1.00E-4
Melanoma															
LOX IMVI	0.469	2.965	2.863	1.804	1.009	0.470	0.368	95	53	22		-15	1.27E-7	1.06E-5	* 1.00E-4
MALME-3M	0.611	1.677	1.732	1.370	1.336	0.949	0.770	86	52	49	13	-6	5.67E-7	5.20E-5	* 1.00E-4
M14	0.261	1.353	1.261	0.640	0.366	0.262	0.279	92	35	10		2	5.37E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
MDA-MB-435	0.534	2.326	2.216	0.336	0.402	0.414	0.275	94	-37	-25	-22	-49	2.16E-6	5.20E-5	* 1.00E-4
SK-MEL-2	1.067	2.117	2.068	1.912	1.557	1.131	0.942	97	80	46	4	-13	7.44E-7	1.75E-5	* 1.00E-4
SK-MEL-2B	0.701	2.132	2.018	1.464	1.378	1.202	0.696	92	55	47	35	-6	4.33E-7	6.90E-5	* 1.00E-4
SK-MEL-5	0.673	2.648	2.467	1.596	0.715	0.302	0.418	91	41	-18	-65	-52	6.59E-6	4.95E-7	4.73E-5
UACC-257	0.912	2.364	2.152	1.837	1.671	1.555	1.049	85	64	66	44	9	5.46E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
UACC-62	1.146	3.016	2.829	1.656	1.656	1.332	0.934	90	38	38	10	-19	5.66E-6	2.21E-5	* 1.00E-4
Ovarian Cancer															
IGROV1	0.532	2.136	2.047	1.650	0.900	0.623	0.409	94	70	23	6	-23	2.63E-7	1.57E-5	* 1.00E-4
OVCAR-3	0.560	2.074	2.012	0.965	0.581	0.727	0.523	96	28	7	11	-6	4.79E-6	3.70E-5	* 1.00E-4
OVCAR-4	0.743	1.744	1.704	1.691	1.172	0.689	0.435	96	95	43	26	-41	7.25E-7	2.35E-5	* 1.00E-4
OVCAR-5	0.664	1.465	1.414	1.416	1.047	0.673	0.731	95	95	48	28	6	9.23E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
OVCAR-8	0.439	2.223	2.130	1.463	0.752	0.621	0.391	95	59	18	10	-11	1.65E-7	3.02E-5	* 1.00E-4
NCIADR-RES	0.586	1.900	1.837	1.166	0.629	0.562	0.383	95	44	3		-35	7.69E-6	5.46E-6	* 1.00E-4
SK-OV-3	1.107	2.292	2.166	2.070	1.546	1.176	1.042	90	61	37	6	-6	5.13E-7	3.13E-5	* 1.00E-4
Renal Cancer															
786-O	0.261	1.822	1.691	0.800	0.667	0.431	0.198	91	34	26	10	-30	5.22E-6	1.77E-5	* 1.00E-4
A498	1.715	2.322	2.195	2.156	1.662	1.301	0.837	79	73	-2	-24	-61	2.02E-7	9.42E-7	6.03E-5
ACHN	0.354	1.405	1.360	0.730	0.664	0.458	0.171	96	36	31	10	-52	5.77E-6	1.45E-5	9.39E-5
CAK1-1	0.764	2.574	2.366	1.562	1.346	0.759	0.243	88	44	32		-66	7.36E-6	9.51E-5	5.37E-5
RUF 393	1.291	2.110	2.006	1.625	1.310	1.354	0.983	86	41	2	8	-24	6.36E-6	1.75E-5	* 1.00E-4
SN12C	0.563	2.408	2.235	1.811	0.969	0.538	0.410	91	68	23	-4	-27	2.49E-7	5.90E-5	* 1.00E-4
TK-10	0.214	1.471	1.399	1.460	0.364	0.210	0.073	94	99	14	-2	-66	3.75E-7	7.56E-6	5.61E-5
UD-31	0.620	1.632	1.450	1.249	1.012	0.697	0.204	82	62	39	4	-67	3.30E-7	1.12E-5	5.73E-5
Prostate Cancer															
PC-3	0.379	1.323	1.211	0.792	0.496	0.412	0.232	86	44	13	3	-39	7.24E-6	1.21E-5	* 1.00E-4
DU-145	0.434	2.007	2.049	1.564	0.665	0.469	0.497	103	72	15	4	4	2.41E-7	* 1.00E-4	* 1.00E-4
Breast Cancer															
MDA-MB-231	0.405	2.190	1.940	1.656	0.717	0.456	0.330	96	71	18	3	-19	2.46E-7	1.39E-5	* 1.00E-4
MDA-MB-231/ATCC	0.731	1.461	1.469	1.460	0.711	0.603	0.341	96	100	-3	-16	-53	3.06E-7	9.40E-7	6.06E-5
H5 578T	1.439	2.730	2.592	1.940	1.775	1.579	1.170	89	39	26	11	-17	6.00E-6	2.47E-5	* 1.00E-4
BT-549	0.667	1.754	1.724	1.346	0.765	0.640	0.477	95	60	7	-6	-31	1.55E-7	3.56E-5	* 1.00E-4
T-47D	0.620	2.390	2.187	2.132	1.729	1.423	0.974	96	82	55	34	4	1.75E-6	* 1.00E-4	* 1.00E-4
MDA-MB-468	0.666	1.767	1.691	1.718	0.665	0.650	0.595	92	95	2	-25	-31	3.03E-7	1.20E-5	* 1.00E-4

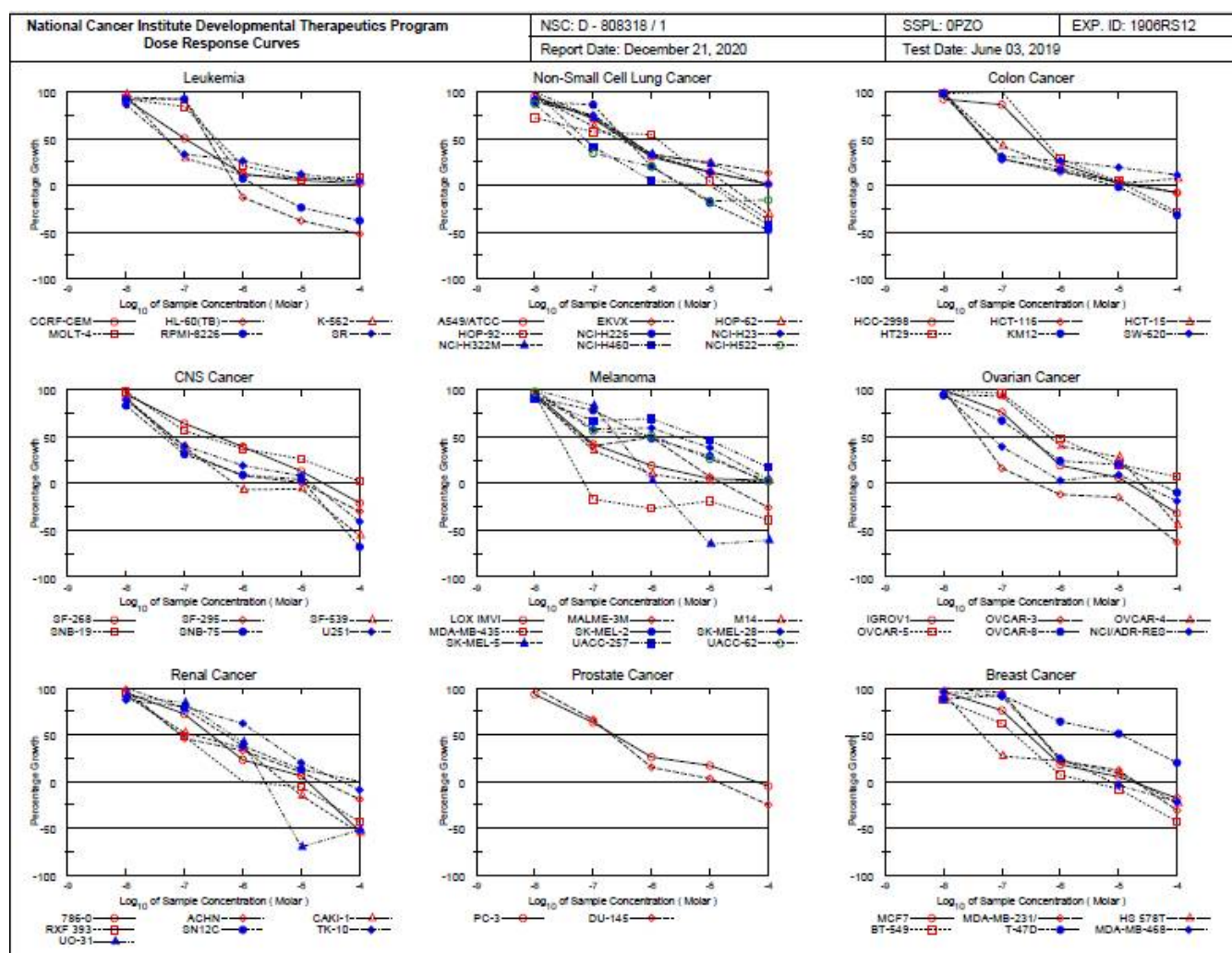
Протокол скринінгу (№1) протипухлинної активності сполуки 6.47



Протокол скринінгу (№1) протипухлинної активності сполуки 6.47



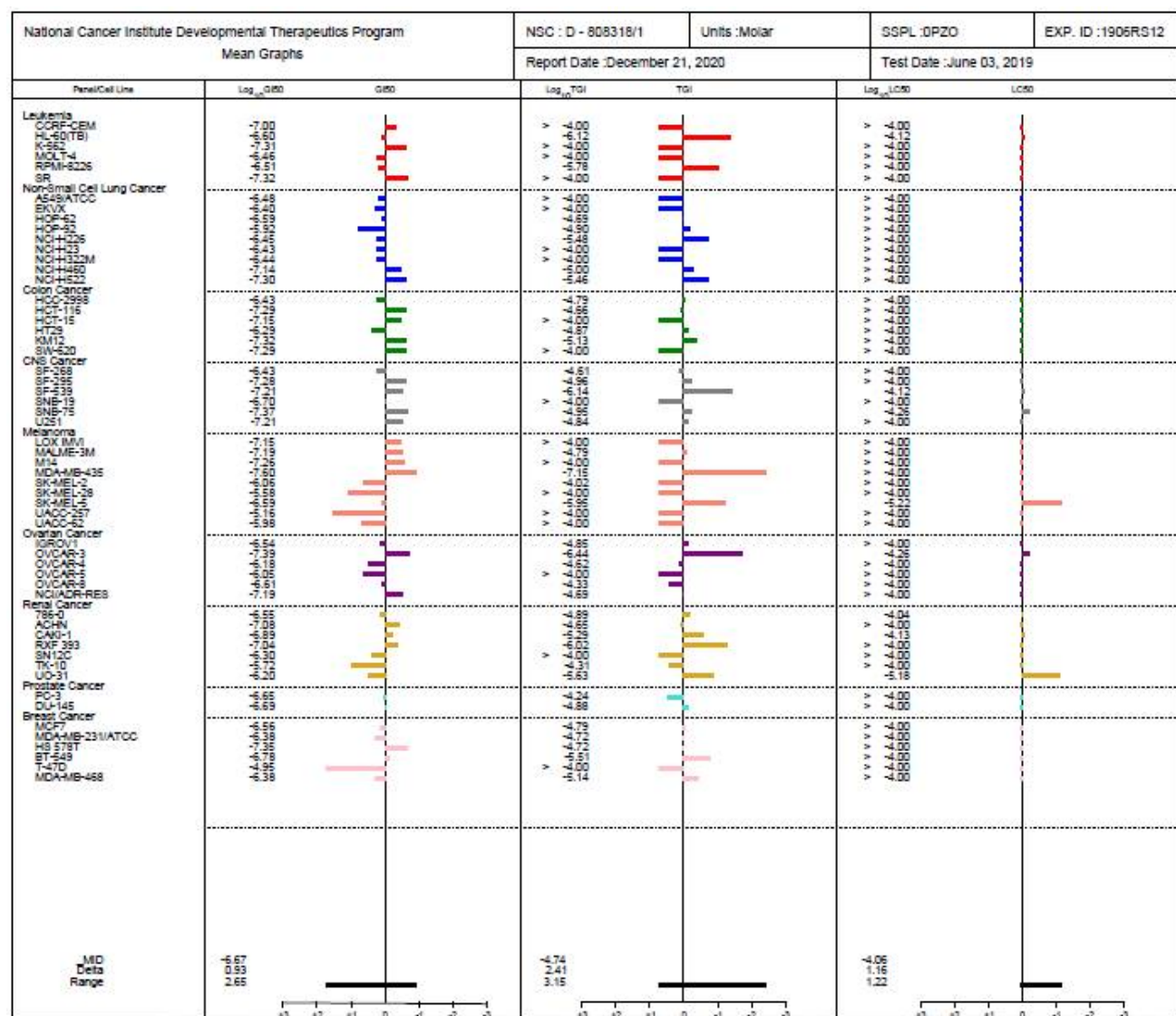
Протокол скринінгу (№2) протипухлинної активності сполуки 6.47



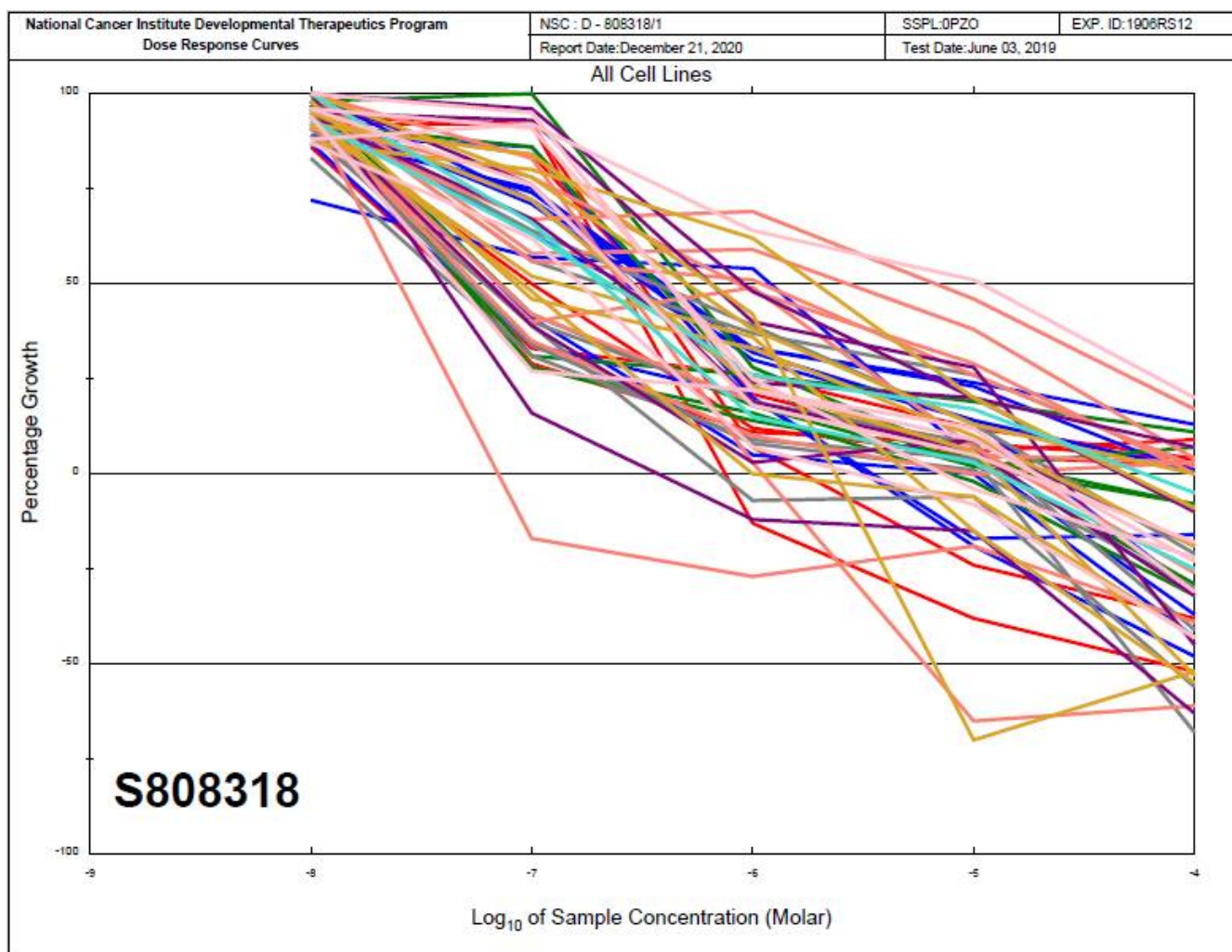
Протокол скринінгу (№2) протипухлинної активності сполуки 6.47

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results															
NSC : D - 808318 / 1			Experiment ID : 1906RS12					Test Type : D8				Units : Molar			
Report Date : December 21, 2020			Test Date : June 03, 2019					QNS :				MC :			
COMI : Les-6009			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related					SSPL : DFZO							
Panel/Cell Line	Time	Ctrl	Log10 Concentration					Percent Growth					GI50	TGI	LC50
			-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0	-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0			
Leukemia															
CCRF-CEM	0.409	2.472	2.302	1.449	0.880	0.522	0.478	92	80	12	5	2	9.95E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HL-60(TB)	0.815	3.209	3.067	3.007	0.712	0.502	0.385	94	92	-13	-38	-52	2.50E-7	7.55E-7	7.55E-6
K-562	0.302	2.872	2.599	0.988	0.574	0.482	0.403	97	29	11	8	4	4.90E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MOLT-4	0.728	2.777	2.623	2.443	1.157	0.854	0.913	92	84	21	5	9	3.45E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
RPMI-6226	1.011	2.925	2.759	2.774	1.141	0.785	0.829	92	92	7	-24	-38	3.11E-7	1.65E-6	> 1.00E-4
SR	0.398	1.881	1.507	0.818	0.725	0.552	0.480	86	33	25	12	4	4.78E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Non-Small Cell Lung Cancer															
A549(ATCC)	0.405	2.185	2.099	1.885	0.948	0.647	0.420	95	71	30	14	1	3.27E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
ECVX	0.818	2.523	2.335	2.068	1.388	1.227	1.037	89	75	33	24	13	3.94E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HOP-82	0.648	2.114	2.044	1.588	1.109	0.844	0.446	95	83	32	14	-31	2.56E-7	2.02E-5	> 1.00E-4
HOP-92	1.270	1.898	1.724	1.831	1.809	1.298	0.802	72	57	54	4	-37	1.20E-6	1.25E-6	> 1.00E-4
NCIHQ26	1.001	2.174	2.041	2.010	1.237	0.814	0.519	89	86	20	-19	-48	3.52E-7	3.30E-6	> 1.00E-4
NCIHQ25	0.519	1.803	1.701	1.470	0.900	0.701	0.530	92	74	32	14	1	3.73E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCIHQ22M	0.703	1.948	1.970	1.805	1.110	0.993	0.709	102	72	33	23		3.66E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCIH460	0.264	2.771	2.841	1.295	0.401	0.269	0.151	103	41	5		-43	7.17E-8	1.01E-6	> 1.00E-4
NCIH522	0.562	2.801	2.583	1.804	1.358	0.820	0.637	87	34	20	-17	-18	4.98E-6	3.44E-6	> 1.00E-4
Colon Cancer															
HCC-2998	0.714	2.818	2.880	2.530	1.190	0.758	0.860	92	86	23	2	-8	3.71E-7	1.63E-5	> 1.00E-4
HCT-116	0.278	2.808	2.887	0.932	0.804	0.389	0.257	103	28	14	4	-8	5.07E-6	2.19E-5	> 1.00E-4
HCT-15	0.495	3.071	3.027	1.571	0.980	0.552	0.669	98	42	18	2	7	7.15E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HT29	0.253	1.875	1.937	2.043	0.743	0.328	0.181	98	104	28	4	-29	5.18E-7	1.35E-5	> 1.00E-4
IMR12	0.500	2.805	2.749	1.148	0.880	0.488	0.342	98	20	16	-2	-32	4.84E-6	7.36E-6	> 1.00E-4
SW620	0.314	2.220	2.155	0.899	0.805	0.575	0.523	97	31	25	19	11	5.09E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CNS Cancer															
SF-298	0.753	2.398	2.311	1.803	1.399	0.972	0.595	95	64	39	13	-21	3.68E-7	2.44E-5	> 1.00E-4
SF-295	0.484	1.831	1.710	0.942	0.591	0.502	0.338	91	34	8	1	-30	5.24E-6	1.10E-5	> 1.00E-4
SF-539	0.729	2.484	2.320	1.412	0.882	0.688	0.319	91	39	-7	-8	-56	5.11E-6	7.19E-7	7.53E-6
SNS-19	0.806	2.396	2.365	1.802	1.273	1.088	0.641	98	56	37	25	2	2.00E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SNS-75	0.710	1.423	1.299	0.932	0.772	0.736	0.224	83	31	9	4	-68	4.29E-6	1.12E-5	5.55E-5
U251	0.388	2.091	1.909	1.085	0.709	0.518	0.228	89	40	19	8	-41	6.21E-6	1.43E-5	> 1.00E-4
Melanoma															
LOX IMVI	0.331	2.821	2.728	1.385	0.800	0.450	0.402	95	42	19	5	3	7.00E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MALME-3M	0.708	1.484	1.428	1.015	1.089	0.759	0.524	93	40	49	7	-25	6.42E-6	1.62E-5	> 1.00E-4
M14	0.482	1.887	1.798	0.949	0.589	0.454	0.485	94	35	10		3	5.50E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-435	0.517	2.584	2.458	0.429	0.377	0.418	0.313	95	-17	-27	-19	-39	2.51E-6	7.03E-6	> 1.00E-4
SK-MEL-2	1.200	2.758	2.831	2.415	1.950	1.647	1.194	92	78	40	29		8.72E-7	9.81E-5	> 1.00E-4
SK-MEL-28	0.894	2.209	2.283	1.578	1.583	1.270	0.795	104	58	59	30	4	2.62E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-5	0.948	3.242	3.235	2.848	1.028	0.331	0.373	100	83	3	-45	-41	2.59E-7	1.12E-6	6.02E-6
UACC-257	0.888	2.351	2.227	1.898	1.926	1.620	1.213	91	67	69	46	17	6.80E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
UACC-62	0.880	2.690	2.581	1.901	1.795	1.348	0.920	98	56	51	25	2	1.05E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Ovarian Cancer															
IGROV1	0.425	1.978	1.984	1.803	0.724	0.513	0.288	101	76	19	8	-32	2.87E-7	1.41E-5	> 1.00E-4
OVCAR-3	0.383	1.459	1.488	0.552	0.336	0.326	0.144	104	16	-12	-15	-53	4.07E-6	3.62E-7	5.48E-6
OVCAR-4	0.508	1.312	1.271	1.258	0.833	0.731	0.280	95	93	40	28	-45	5.58E-7	2.41E-5	> 1.00E-4
OVCAR-5	0.627	1.828	1.627	1.562	1.105	0.824	0.694	100	96	48	20	7	8.97E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-8	0.487	2.334	2.229	1.719	0.828	0.854	0.440	94	87	24	20	-10	2.46E-7	4.71E-5	> 1.00E-4
NCIADR-RE15	0.539	2.189	2.100	1.179	0.593	0.578	0.437	95	39	3	9	-19	5.46E-6	2.04E-5	> 1.00E-4
Renal Cancer															
786-O	0.725	2.851	2.739	2.284	1.218	0.883	0.344	95	72	23	8	-53	2.85E-7	1.29E-5	9.03E-6
ACHN	0.370	1.780	1.729	1.011	0.824	0.509	0.302	98	46	33	10	-19	5.41E-6	2.24E-5	> 1.00E-4
CAK1-1	1.023	2.741	2.801	1.911	1.540	0.875	0.480	92	52	36	-15	-55	1.28E-7	5.15E-6	7.48E-6
RUX 363	1.058	1.797	1.749	1.413	1.048	0.996	0.600	94	48		-5	-43	9.12E-6	9.63E-7	> 1.00E-4
SN12C	0.487	1.940	1.970	1.820	1.021	0.855	0.458	102	78	38	13		5.05E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
TK-10	0.782	2.254	2.067	1.958	1.892	1.077	0.713	87	80	62	20	-9	1.92E-6	4.94E-5	> 1.00E-4
UC-31	0.624	1.852	1.754	1.654	1.135	0.105	0.289	92	84	42	-70	-52	8.32E-7	2.35E-6	6.57E-6
Prostate Cancer															
PC-3	0.680	2.839	2.688	2.038	1.247	1.040	0.644	93	83	26	17	-5	2.25E-7	5.71E-5	> 1.00E-4
DU-145	0.439	1.894	1.813	1.398	0.857	0.488	0.329	101	86	15	3	-25	2.05E-7	1.31E-5	> 1.00E-4
Breast Cancer															
MCF7	0.398	2.515	2.424	1.999	0.773	0.503	0.326	98	78	18	5	-18	2.77E-7	1.63E-5	> 1.00E-4
MDA-MB-231(ATCC)	0.821	1.735	1.787	1.883	0.870	0.760	0.427	103	95	22	12	-31	4.18E-7	1.93E-5	> 1.00E-4
HS 578T	0.882	2.089	2.000	1.271	1.222	1.078	0.759	94	27	22	9	-23	4.48E-6	1.89E-5	> 1.00E-4
BT-549	0.864	2.130	1.985	1.559	1.067	0.909	0.559	87	62	7	-8	-43	1.68E-7	3.07E-6	> 1.00E-4
T-47D	0.837	2.071	1.922	1.970	1.625	1.472	1.078	88	92	64	51	20	1.11E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-468	0.785	2.031	1.975	1.918	1.091	0.754	0.615	98	91	25	-4	-22	4.14E-7	7.27E-6	> 1.00E-4

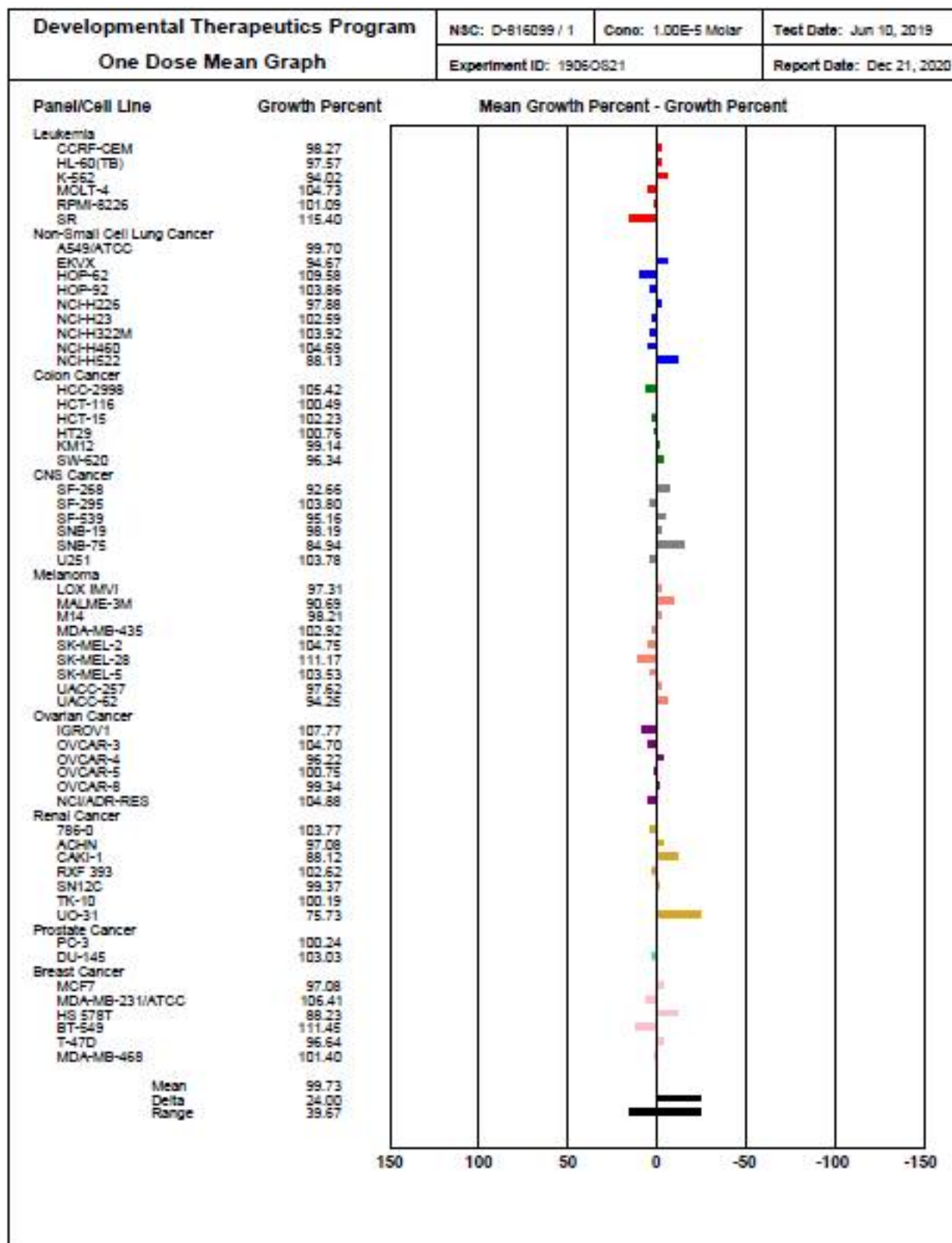
Протокол скринінгу (№2) протипухлинної активності сполуки 6.47



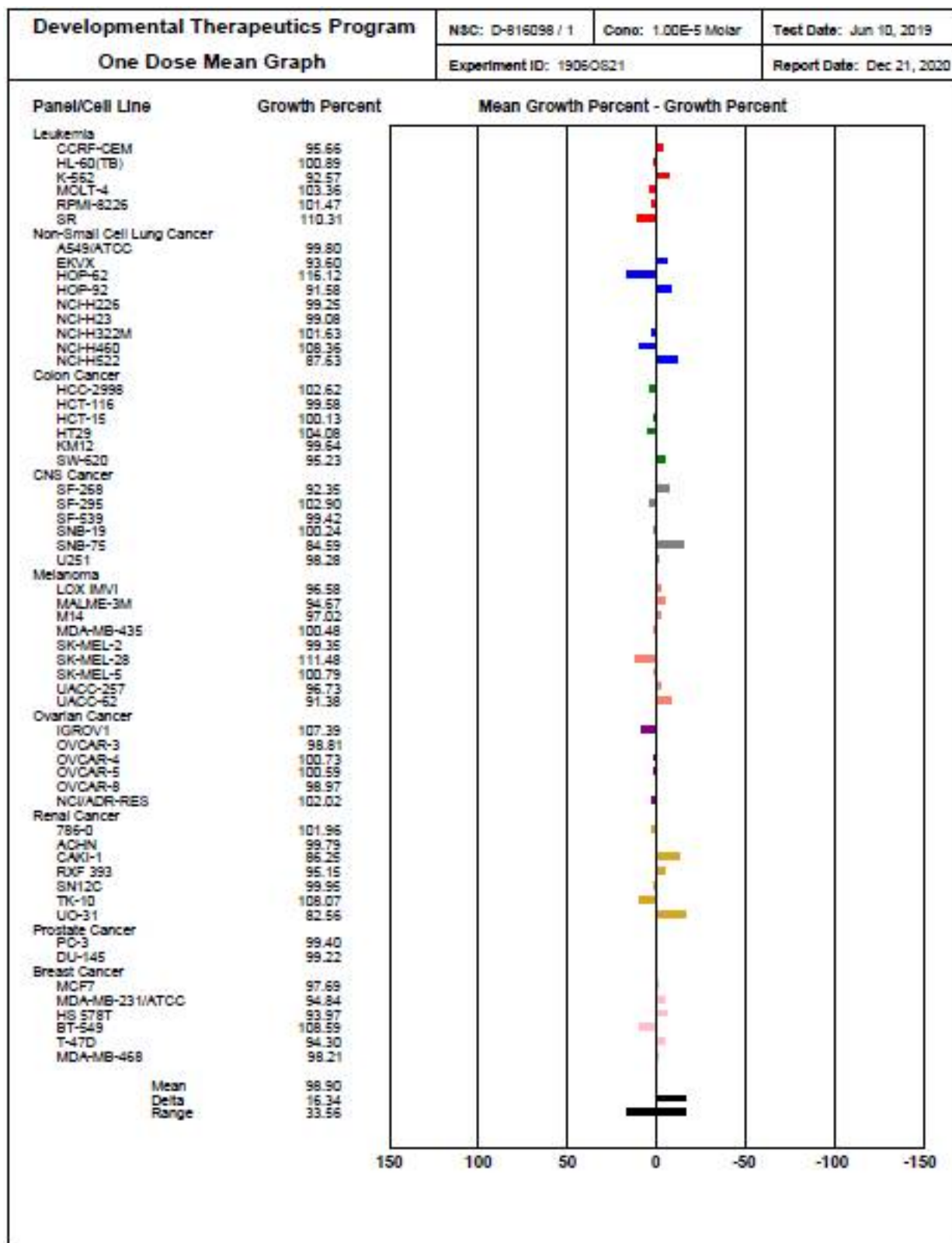
Протокол скринінгу (№2) протипухлинної активності сполуки 6.47



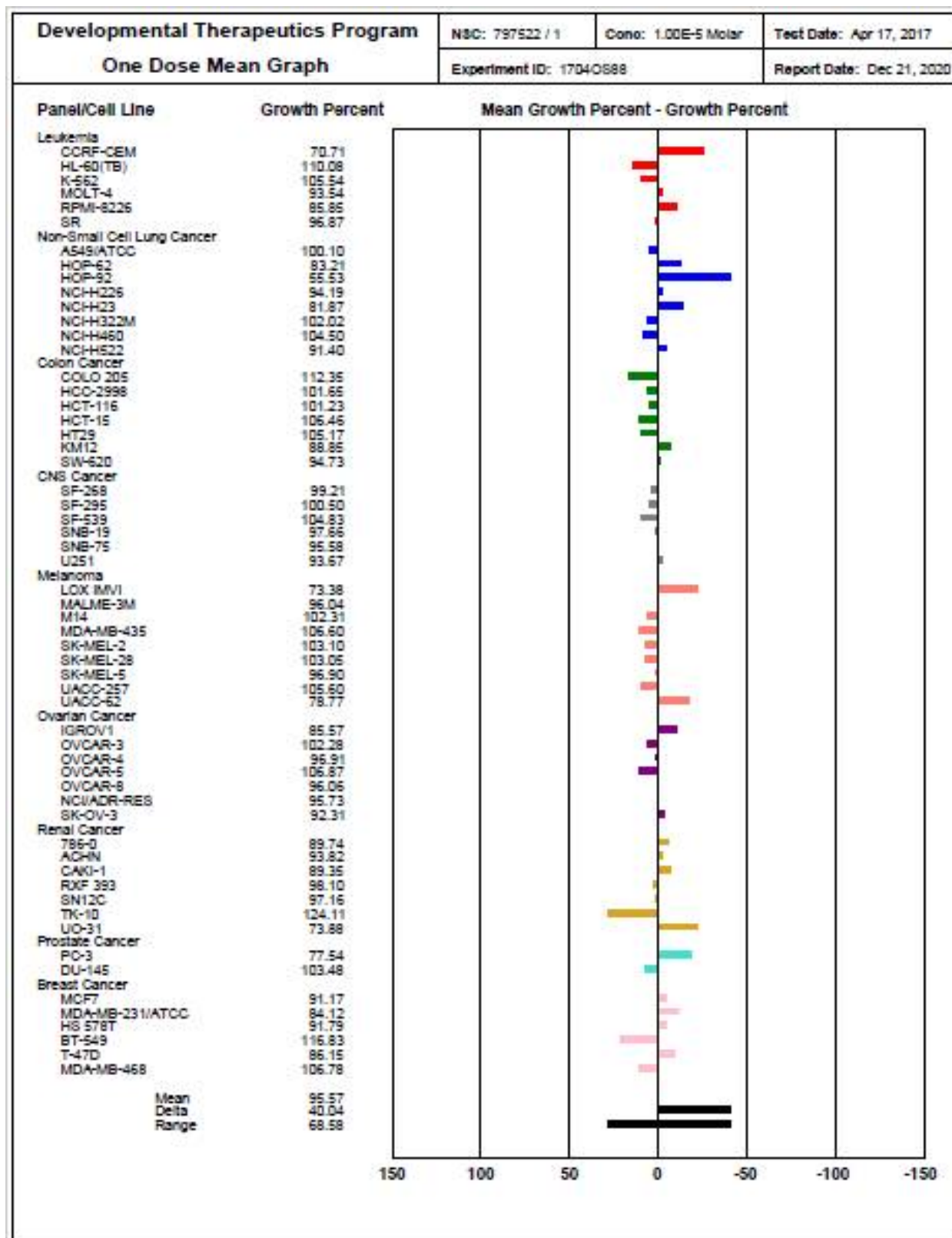
Протокол скринінгу протипухлинної активності
5-хлоро-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5-іліденметил)-1Н-індол-2-
карбонової кислоти 6.48 (10⁻⁵М)



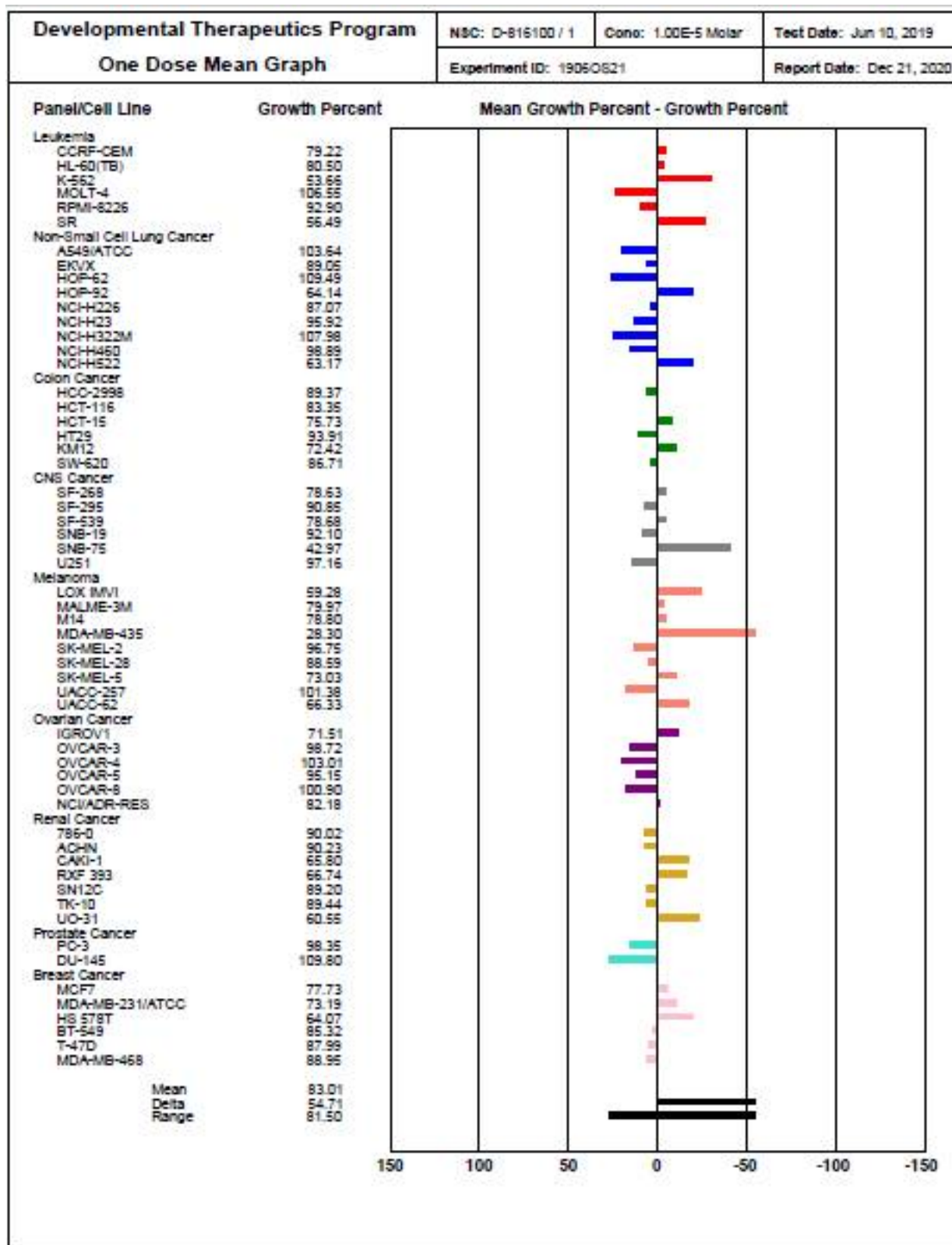
Протокол скринінгу протипухлинної активності
5-метокси-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5їліденметил)-1Н-індол-2-
карбонової кислоти 6.49 (10⁻⁵M)



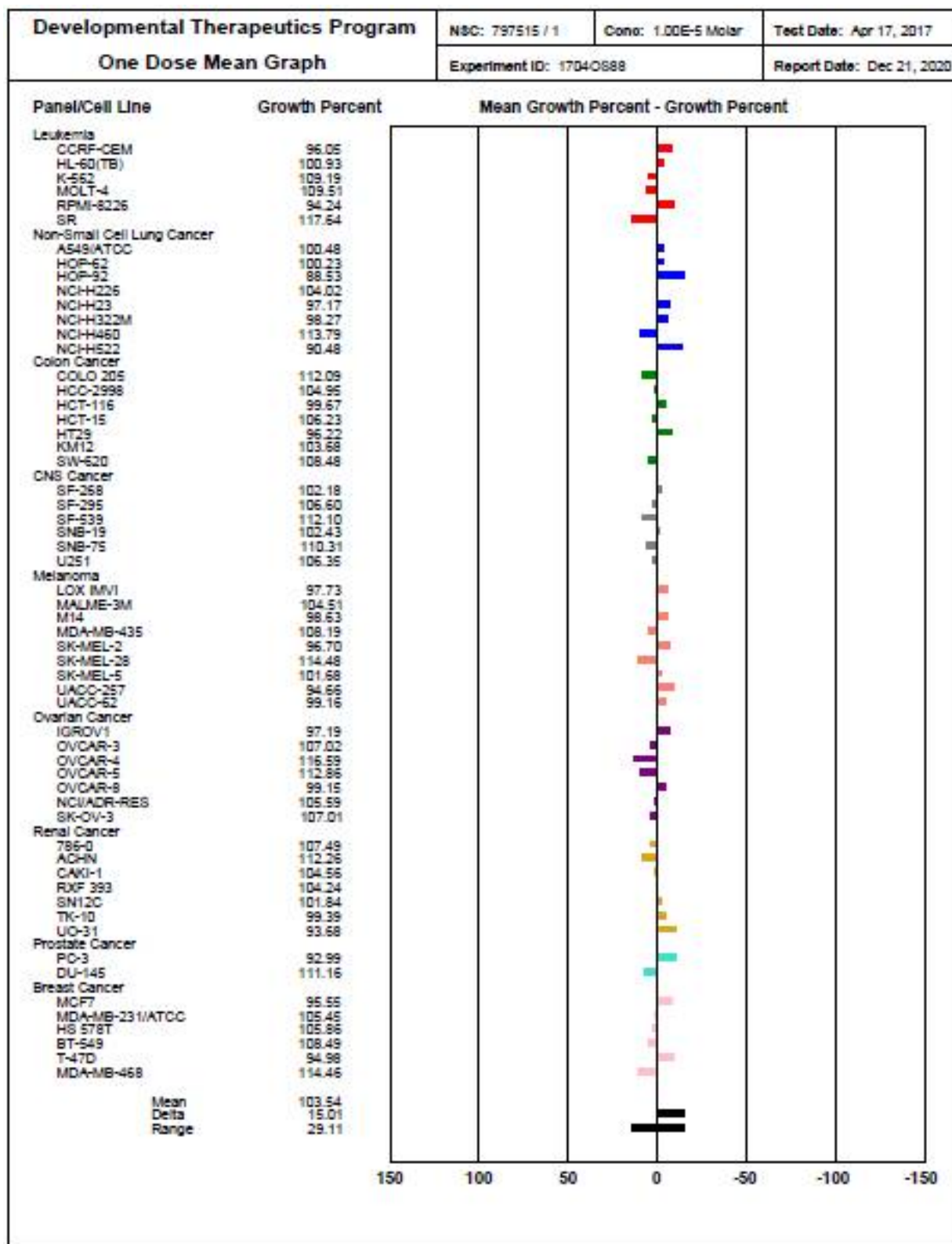
Протокол скринінгу протипухлинної активності метилового естеру 4,6-диметокси-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5-іліденметил)-1Н-індол-2-карбонової кислоти 6.50 (10⁻⁵М)



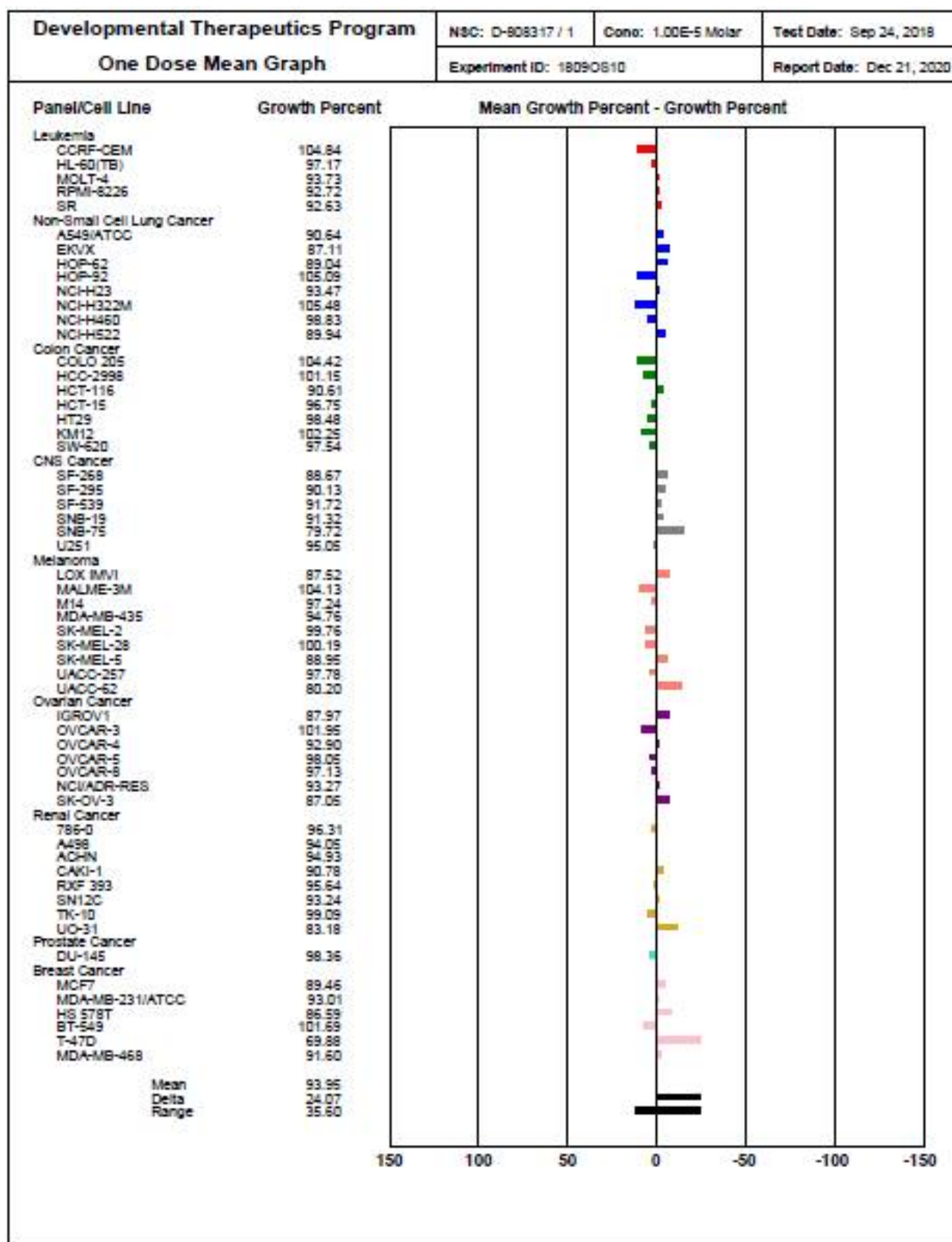
Протокол скринінгу протипухлинної активності
6-метокси-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5іліденметил)-1Н-індол-2-
карбонової кислоти 6.51 (10⁻⁵М)



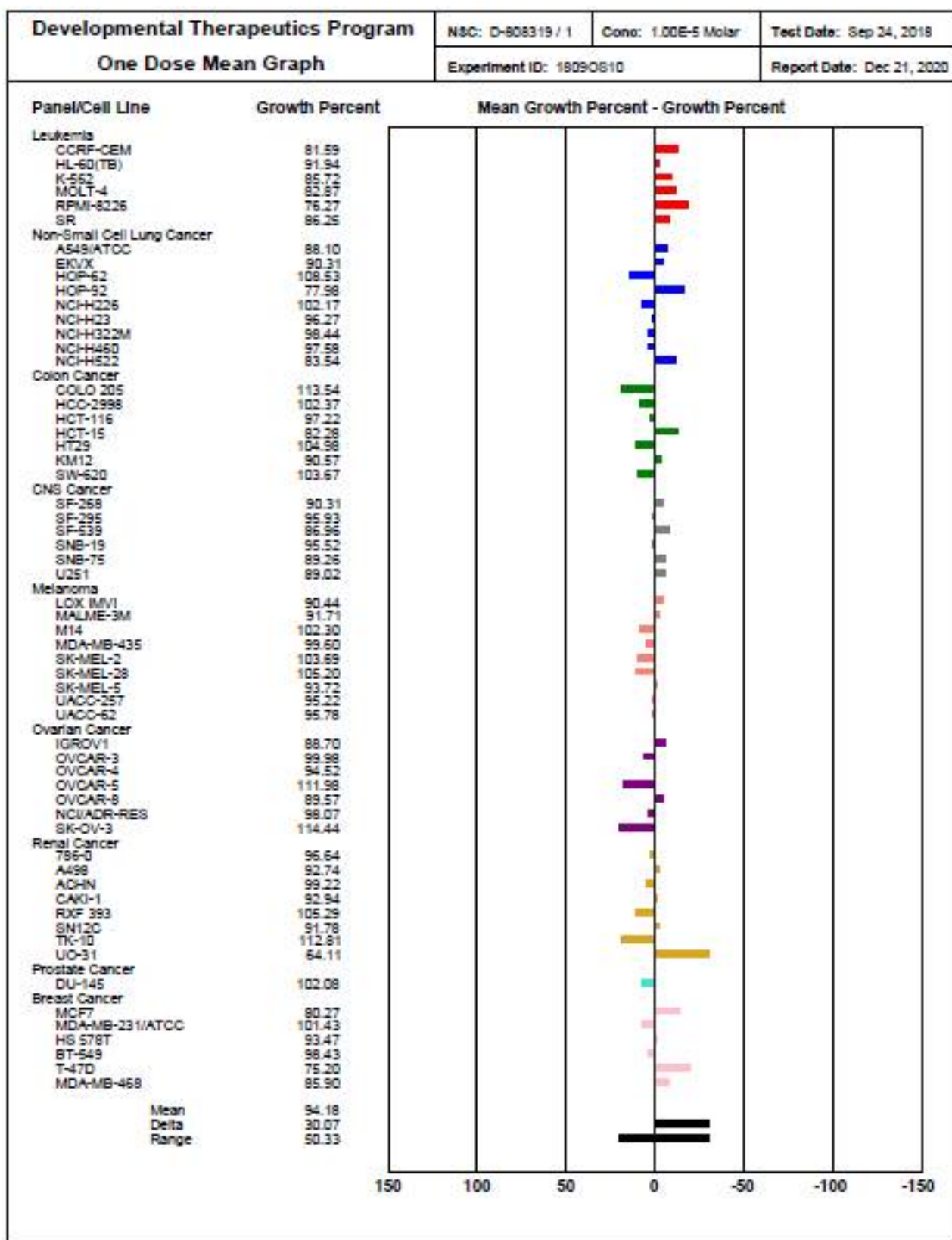
Протокол скринінгу протипухлинної активності
5,6-диметокси-3-(4-оксо-2-тіоксо-тіазолідин-5-іліденметил)-1Н-індол-2-
карбонової кислоти 6.52 (10⁻⁵М)



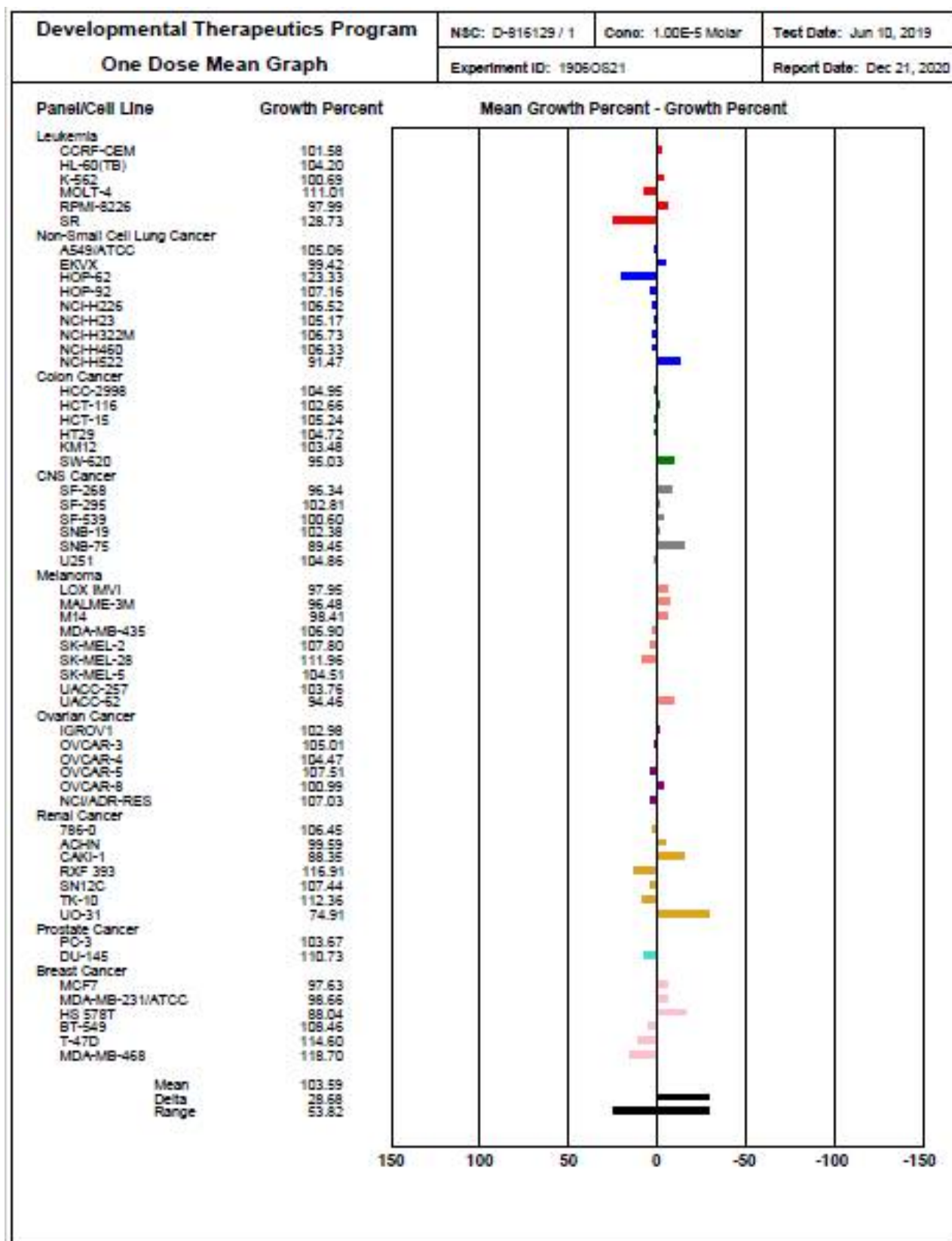
Протокол скринінгу протипухлинної активності 6,7-диметокси-9H-1-оксо-тіопірано[3,4-*b*]індол-3-карбонової кислоти 6.54 (10^{-5} M)



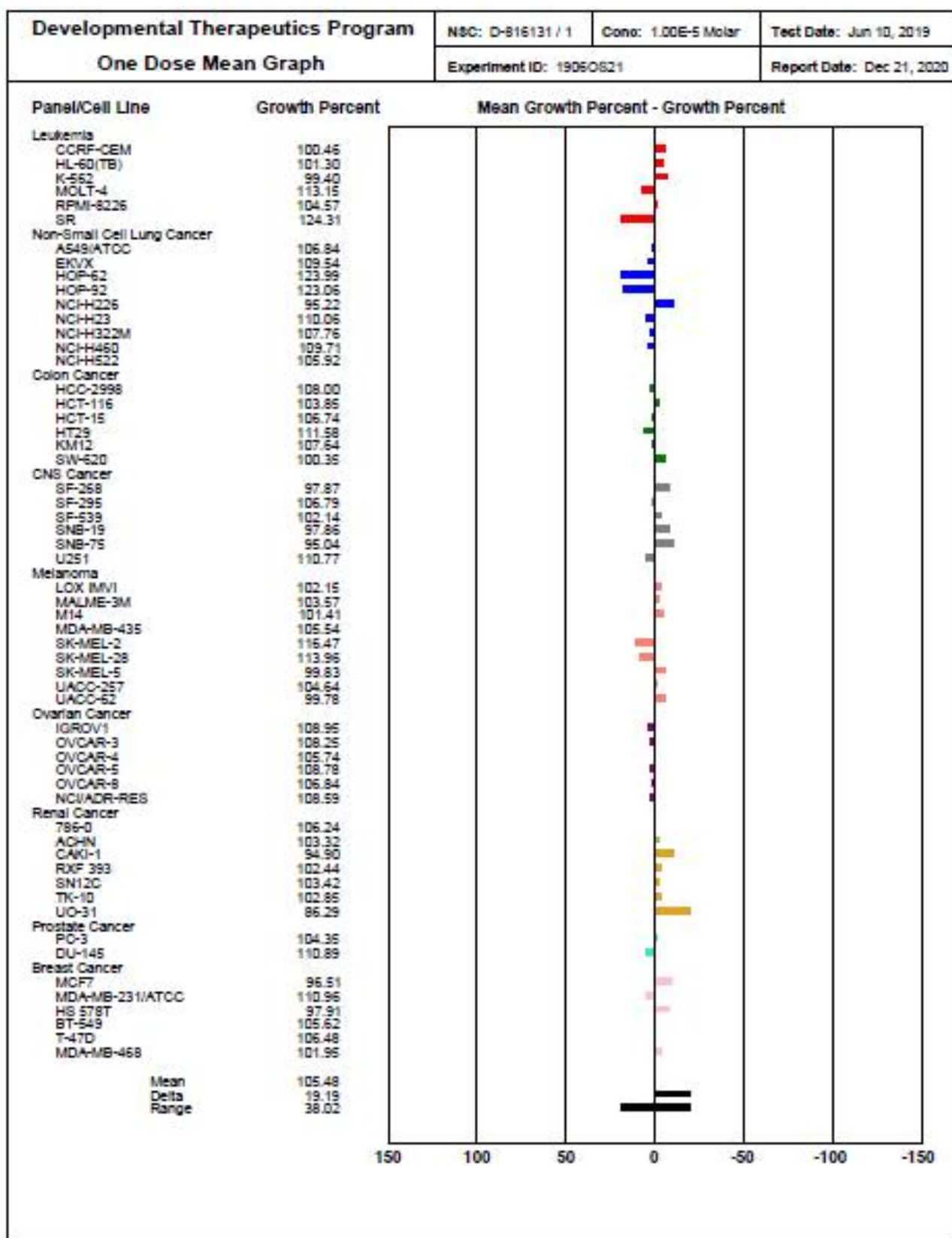
Протокол скринінгу протипухлинної активності 6-флюоро-9-метил-1-оксо-тіопірано[3,4-*b*]індол-3-карбонової кислоти 6.55 (10⁻⁵M)



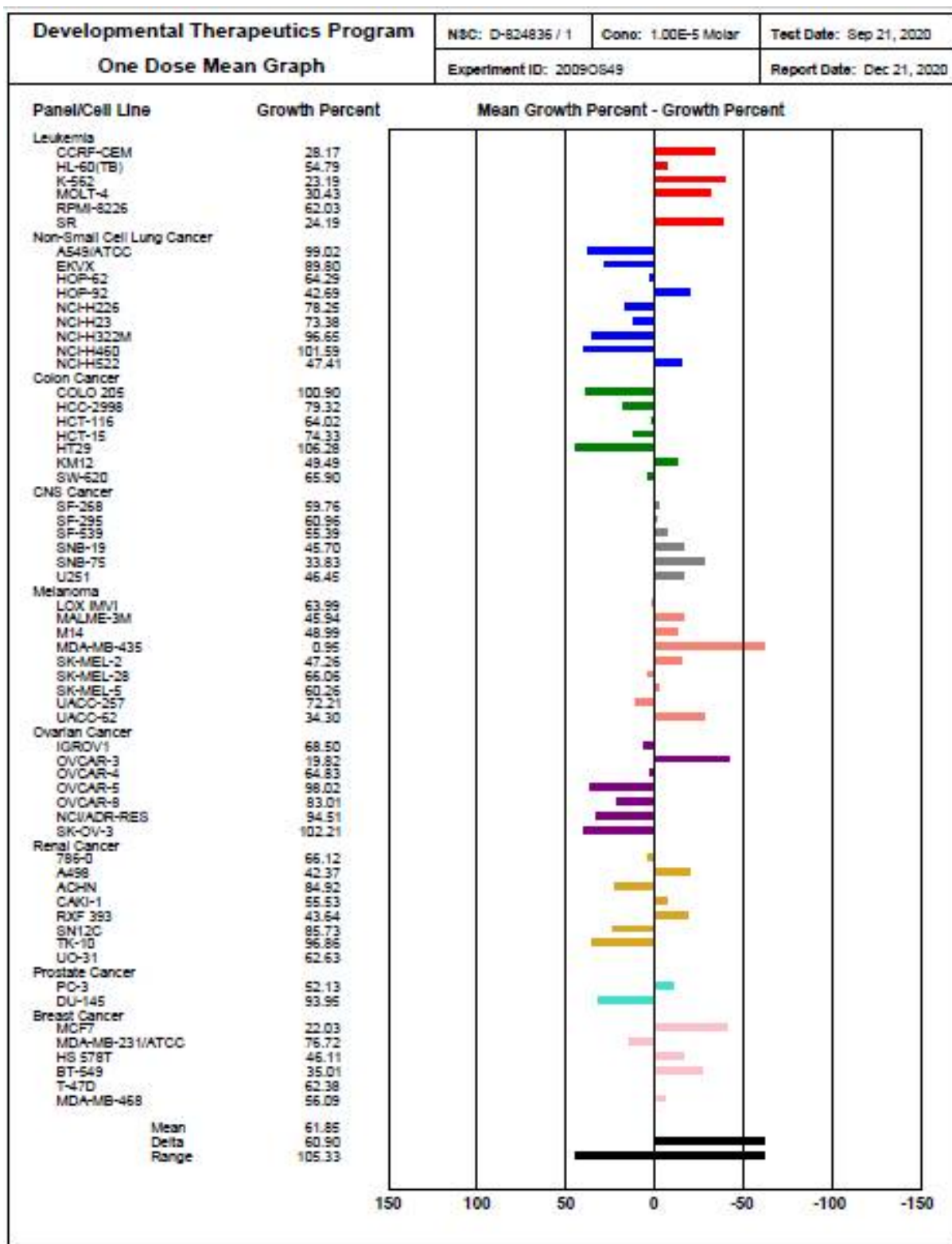
Протокол скринінгу протипухлинної активності 6-хлоро-1-оксо-9Н-тіопірано[3,4-*b*]індол-3-карбонової кислоти 6.56 (10⁻⁵М)



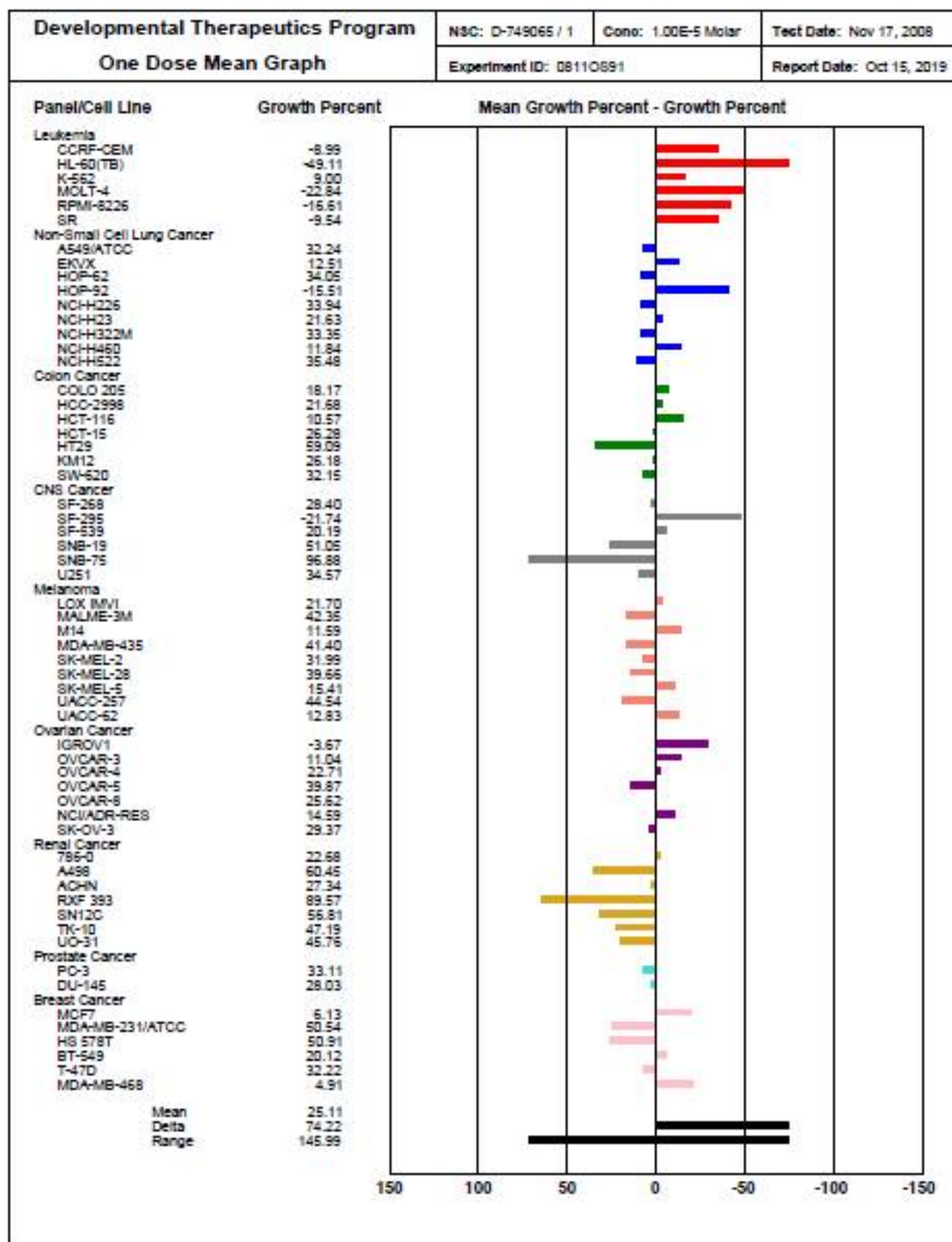
Протокол скринінгу протипухлинної активності 6-метокси-1-оксо-9Н-тіопірано[3,4-*b*]індол-3-карбонової кислоти 6.57 (10⁻⁵М)



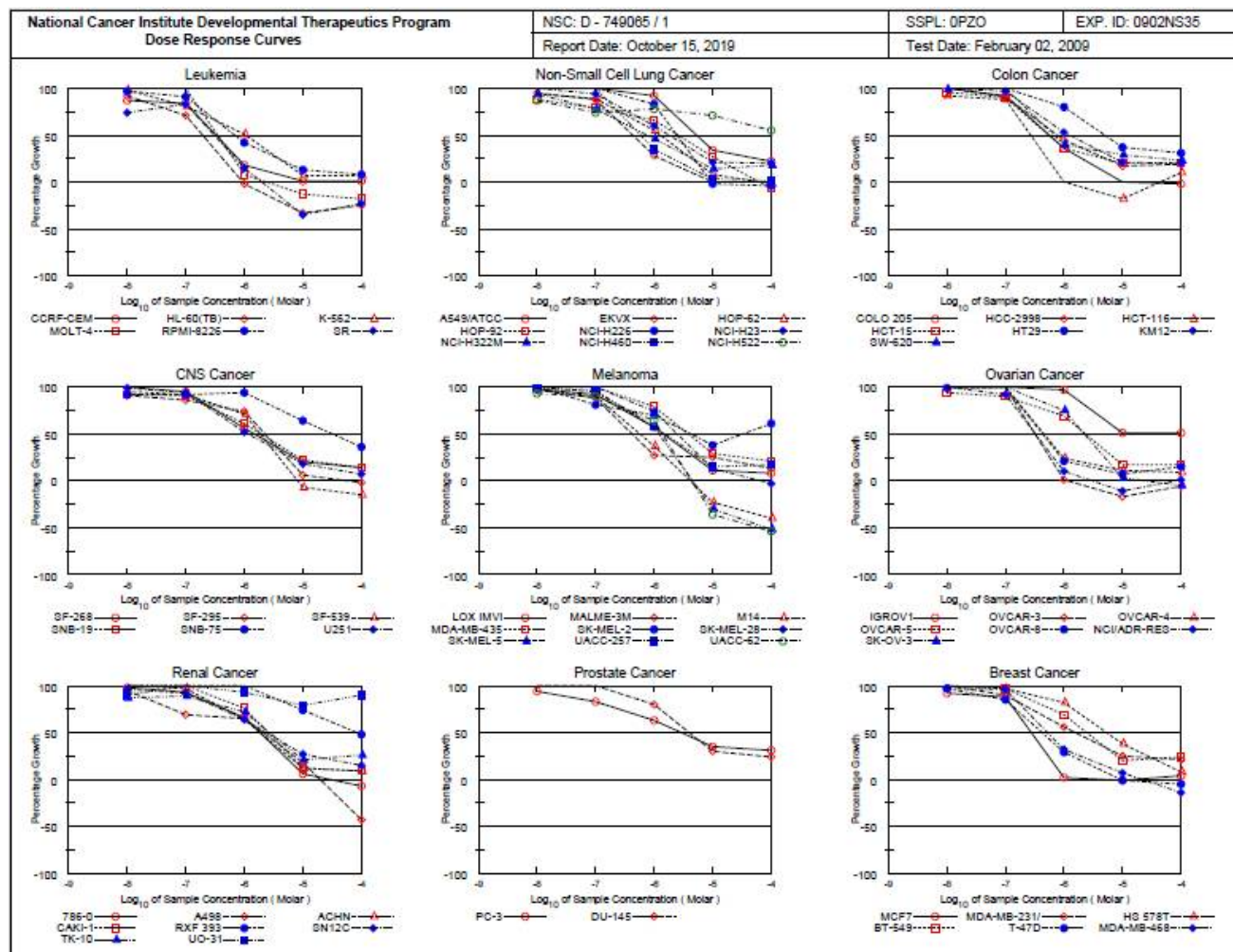
Протокол скринінгу протипухлинної активності
метил 5-флюоро-3-[(2-(4-гідроксianіліно)-4-оксо-тіазол-5-іліден)метил]-1H-індол-2-карбоксилату 7.32 (10^{-5}M)



Протокол скринінгу протипухлинної активності 4-[3-(5-бромо-2-гідроксифеніл)-5-феніл-3,4-дигідропіразол-2-іл]-5Н-тіазол-2-ону и 7.40 (10⁻⁵М)



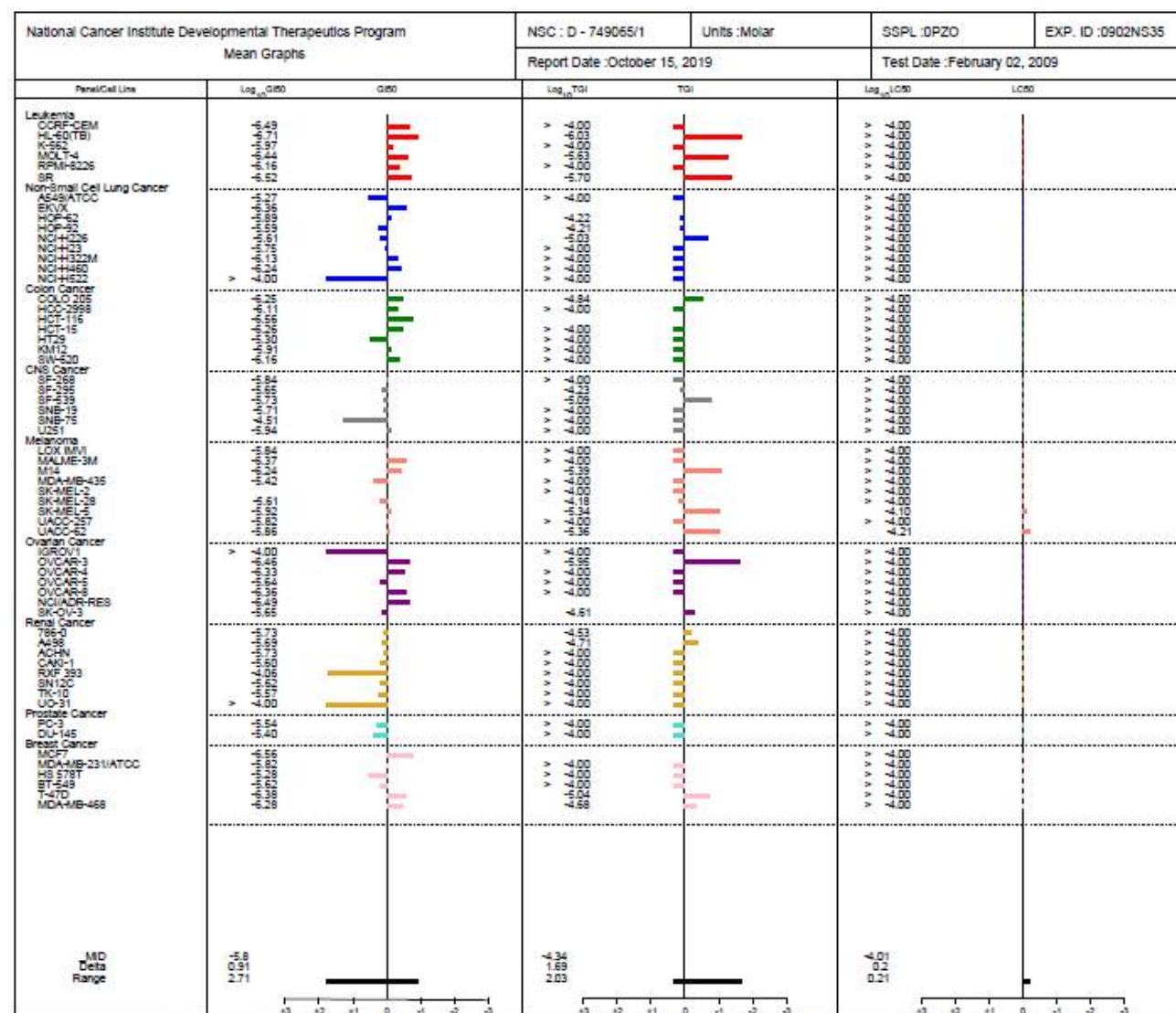
Протокол скринінгу (№ 1) протипухлинної активності сполуки 7.40 у градієнті концентрацій



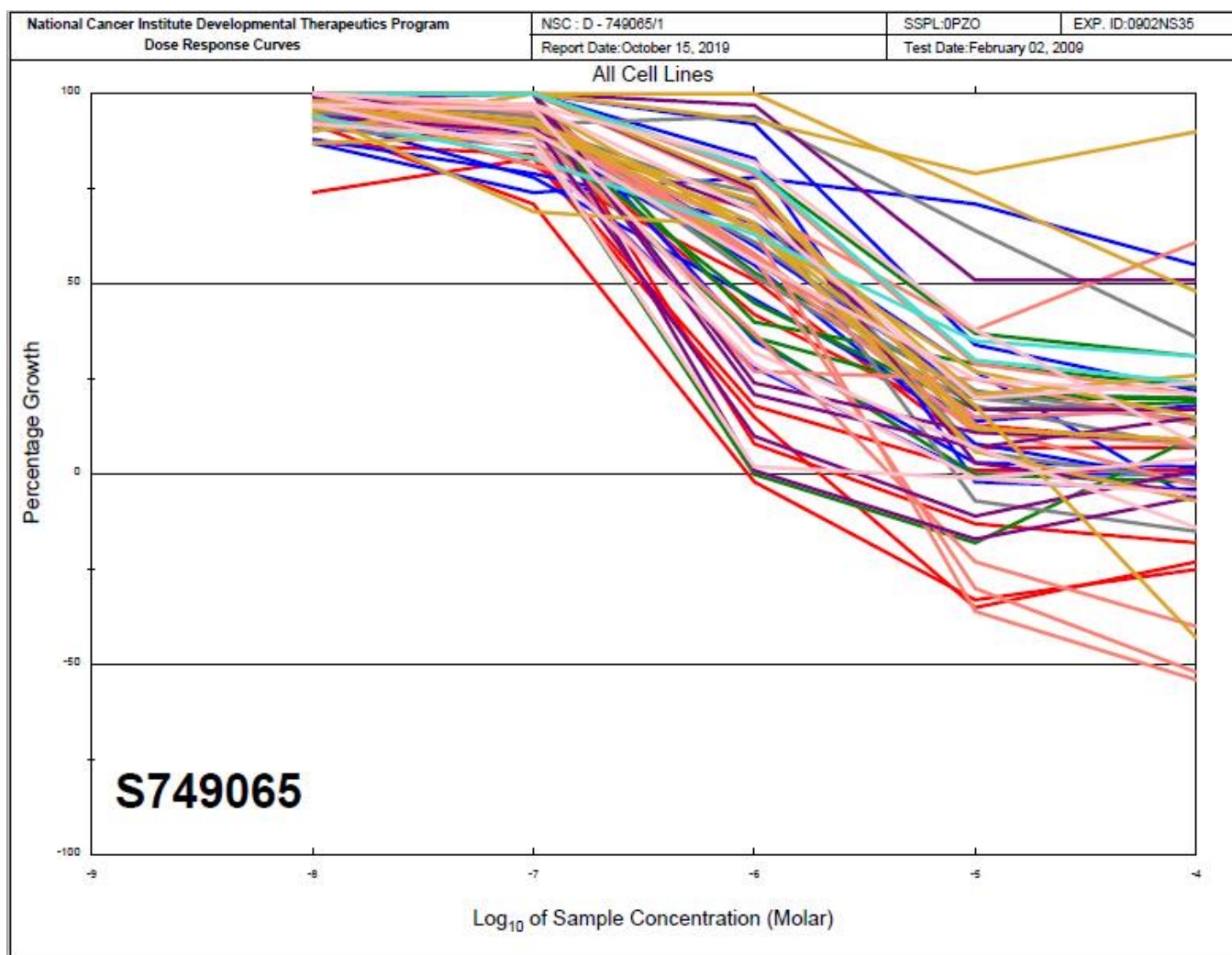
Протокол скринінгу (№ 1) протипухлинної активності сполуки 7.40

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results																		
NSC : D - 749065 / 1			Experiment ID : D902NS35						Test Type : 08			Units : Molar						
Report Date : October 15, 2019			Test Date : February 02, 2009						QNS :			MC :						
COMI : Les-772 (S9557)			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related						SRPL : DF20									
Panel/Cell Line	Time	Zero	Ctrl	Log10 Concentration						Percent Growth						GR50	TGI	LC50
				-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0	-3.0	-2.0	-1.0	-0.0	-0.0	-1.0	-2.0			
Leukemia																		
CCRF-CEM	0.878	1.940	1.775	1.742	0.900	0.687	0.689	87	84	18	1	1	3.27E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HL-60(TB)	0.986	1.978	1.902	1.887	0.988	0.857	0.744	92	71	-2	-33	-25	1.93E-7	9.42E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
K-562	0.252	1.159	1.151	0.996	0.723	0.316	0.314	96	81	51	7	7	1.07E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
MOLT-4	0.530	1.617	1.854	1.857	0.814	0.460	0.438	103	104	8	-13	-18	3.62E-7	2.33E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
RPMI-8226	0.854	1.878	1.843	1.790	1.287	0.984	0.936	97	91	42	13	8	6.97E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SR	0.425	0.947	0.810	0.858	0.503	0.276	0.326	74	83	15	-35	-23	3.02E-7	1.98E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
Non-Small Cell Lung Cancer																		
A549(ATCC)	0.245	1.158	1.201	1.197	1.089	0.596	0.448	105	104	92	34	22	5.33E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
EOVK	0.596	1.328	1.287	1.240	0.803	0.592	0.599	95	88	28	-	-	4.34E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HOP-62	0.482	1.071	1.037	1.004	0.793	0.502	0.442	94	89	55	8	-2	1.28E-8	5.98E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HOP-92	0.024	1.307	1.251	1.205	1.142	0.995	0.764	86	79	66	27	-7	2.55E-8	8.13E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
NCI-H1026	0.670	1.233	1.232	1.251	1.136	0.696	0.643	100	103	83	-2	-4	2.46E-8	9.43E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
NCI-H103	0.685	1.791	1.815	1.719	1.335	0.902	0.887	102	94	60	21	20	1.77E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
NCI-H1322M	0.621	2.015	1.932	1.715	1.261	0.813	0.878	94	78	46	14	18	7.49E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
NCI-H460	0.261	2.224	2.279	2.223	0.941	0.321	0.300	103	100	35	3	2	5.62E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
NCI-H522	0.396	0.792	0.740	0.686	0.705	0.678	0.613	87	74	78	71	55	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
Colon Cancer																		
COLO 205	0.260	0.998	1.022	0.942	0.540	0.283	0.274	103	92	36	-	-2	5.67E-7	1.46E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HCC-2998	0.803	1.848	1.850	1.736	1.207	0.878	0.907	100	91	45	17	19	7.91E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HCT-116	0.251	1.773	1.858	1.597	0.258	0.206	0.406	92	88	-	-18	10	2.74E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HCT-15	0.378	2.217	2.139	2.041	1.035	0.741	0.748	96	90	36	20	20	5.50E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HT29	0.149	0.931	1.002	1.023	0.773	0.439	0.388	109	112	80	37	31	4.97E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
KMI-2	0.486	2.185	2.242	2.141	1.375	0.832	0.810	103	97	53	21	20	1.24E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SW-620	0.291	1.585	1.555	1.587	0.804	0.683	0.590	99	102	40	29	23	6.94E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
CNS Cancer																		
SF-268	0.362	1.123	1.232	1.086	0.757	0.516	0.488	114	95	56	20	14	1.46E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SF-295	1.371	3.183	2.997	2.915	2.689	1.483	1.345	91	86	74	8	-2	2.24E-8	5.93E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SF-639	0.743	2.251	2.207	2.183	1.838	0.694	0.630	95	92	71	-7	-15	1.87E-8	8.21E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SNB-19	0.642	1.513	1.447	1.439	1.177	0.834	0.781	92	91	61	22	14	1.94E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SNB-75	0.585	1.125	1.083	1.081	1.063	0.929	0.790	92	92	94	64	36	3.12E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
U251	0.238	1.434	1.418	1.381	0.960	0.451	0.315	99	94	52	18	7	1.15E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
Melanoma																		
LOX IMVi	0.270	1.913	1.886	1.794	1.213	0.458	0.401	96	92	57	11	8	1.45E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
MALME-3M	0.738	1.891	1.844	1.745	1.027	0.987	0.882	97	88	27	25	13	4.24E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
M14	0.256	0.890	0.985	0.829	0.491	0.197	0.154	97	90	37	-23	-40	5.73E-7	4.12E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
MDA-MB-435	0.472	1.748	1.795	1.743	1.480	0.841	0.740	103	100	79	29	21	3.79E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SK-MEL-2	0.507	0.713	0.737	0.673	0.551	0.596	0.532	112	81	70	38	61	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SK-MEL-28	0.479	1.154	1.306	1.252	0.906	0.559	0.495	132	127	74	13	-3	2.48E-8	6.58E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SK-MEL-5	0.327	2.280	2.272	2.184	1.431	0.231	0.196	100	95	57	-30	-52	1.19E-8	4.54E-8	7.93E-8	> 1.00E-4		
UACC-257	0.602	1.361	1.351	1.334	1.040	0.717	0.728	99	96	58	15	17	1.51E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
UACC-62	0.265	0.699	0.853	0.834	0.674	0.171	0.123	93	90	64	-38	-54	1.40E-8	4.40E-8	5.19E-8	> 1.00E-4		
Ovarian Cancer																		
IGROV1	0.319	0.680	0.687	0.700	0.670	0.504	0.503	102	105	97	51	51	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
OVCA1-3	0.361	0.969	1.059	1.014	0.385	0.299	0.341	120	107	1	-17	-5	3.46E-7	1.11E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
OVCA1-4	0.397	1.213	1.280	1.243	0.594	0.405	0.468	106	104	24	11	9	4.73E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
OVCA1-5	0.475	0.695	0.859	0.844	0.758	0.546	0.549	94	90	69	17	17	2.29E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
OVCA1-6	0.302	1.233	1.227	1.252	0.467	0.367	0.446	99	102	21	7	15	4.38E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
NCIADR-RED	0.556	1.597	1.656	1.517	0.882	0.496	0.569	106	92	10	-11	1	3.27E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SK-OV-3	0.621	1.344	1.370	1.347	1.185	0.642	0.593	104	100	75	3	-5	2.23E-8	2.47E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
Renal Cancer																		
786-O	0.594	2.080	2.044	1.977	1.577	0.682	0.555	96	93	66	6	-7	1.85E-8	2.96E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
A-498	1.150	1.589	1.585	1.455	1.433	1.229	0.652	95	89	85	18	-43	2.05E-8	1.96E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
ACHN	0.334	1.406	1.410	1.374	1.019	0.459	0.436	100	97	64	12	9	1.84E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
CAKI-1	0.864	2.305	2.335	2.347	1.955	1.037	0.965	102	103	76	12	9	2.53E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
RUF 363	0.394	1.087	1.115	1.107	1.106	0.910	0.732	104	103	103	74	48	8.74E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
SN12C	0.544	1.616	1.788	1.717	1.360	0.895	0.735	95	92	64	27	15	2.38E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
TK-10	0.589	1.315	1.222	1.240	1.115	0.751	0.787	87	89	72	21	26	2.72E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
UD-31	0.480	0.624	0.627	0.648	0.612	0.589	0.608	90	115	93	79	90	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
Prostate Cancer																		
PC-3	0.422	1.336	1.283	1.184	1.001	0.739	0.703	94	83	83	35	31	2.91E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
DU-145	0.297	1.185	1.295	1.297	1.007	0.561	0.510	109	113	80	30	24	3.95E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
Breast Cancer																		
MDCF7	0.285	1.529	1.428	1.374	0.290	0.262	0.311	92	88	2	-1	4	2.75E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
MDA-MB-231(ATCC)	0.489	1.306	1.319	1.229	0.944	0.690	0.680	101	90	56	25	21	1.51E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
HS 578T	0.889	1.502	1.585	1.482	1.252	0.986	0.751	110	97	82	38	8	5.24E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
BT-549	1.527	2.663	2.729	2.628	2.306	1.750	1.601	106	97	69	20	34	2.41E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
T-47D	0.705	1.399	1.377	1.293	0.907	0.696	0.669	97	85	29	-1	-5	4.21E-7	9.08E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		
MDA-MB-468	0.404	1.086	1.068	1.059	0.825	0.490	0.347	97	95	32	7	-14	5.29E-7	2.08E-8	> 1.00E-4	> 1.00E-4		

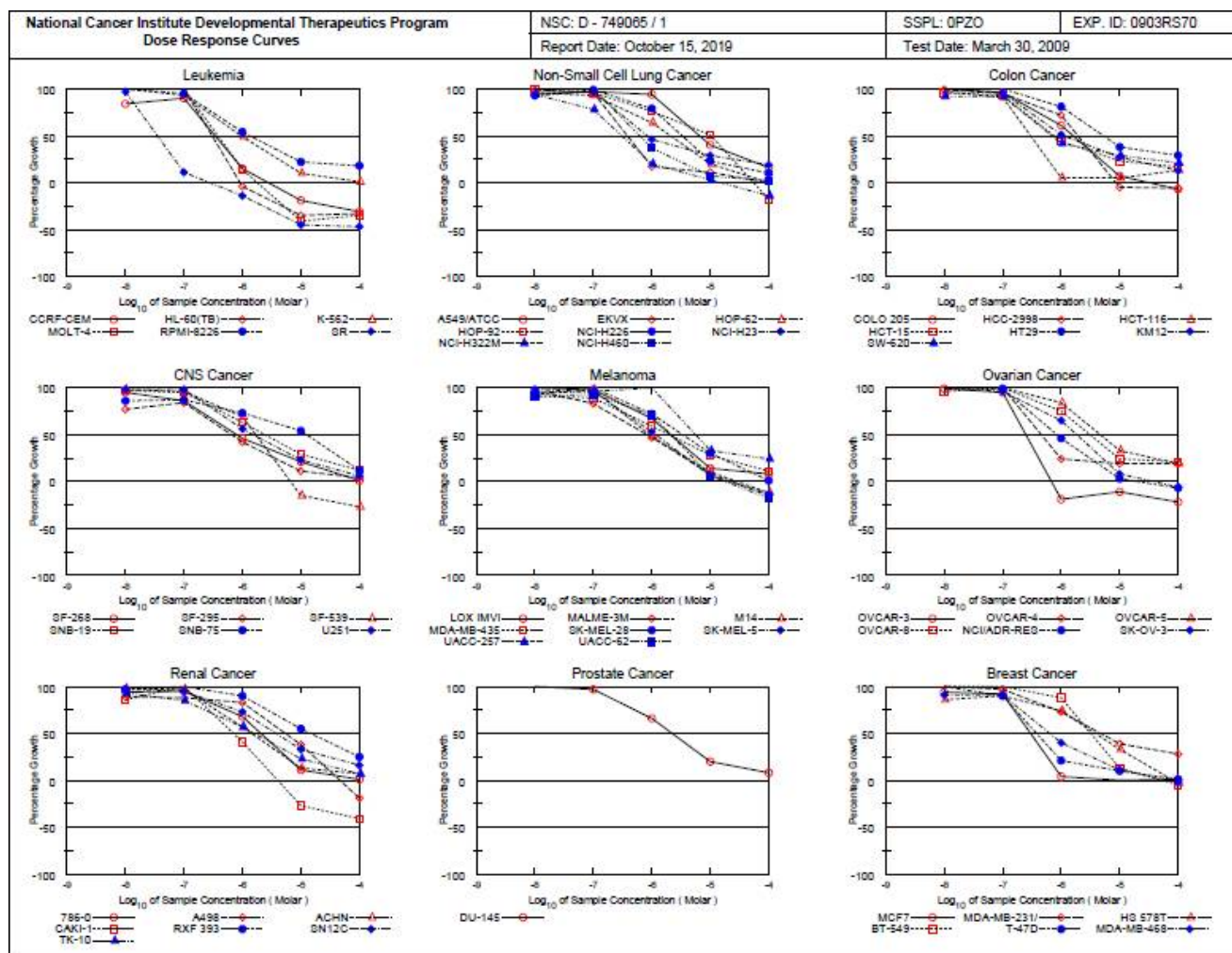
Протокол скринінгу (№ 1) протипухлинної активності сполуки 7.40



Протокол скринінгу (№ 1) протипухлинної активності сполуки 7.40



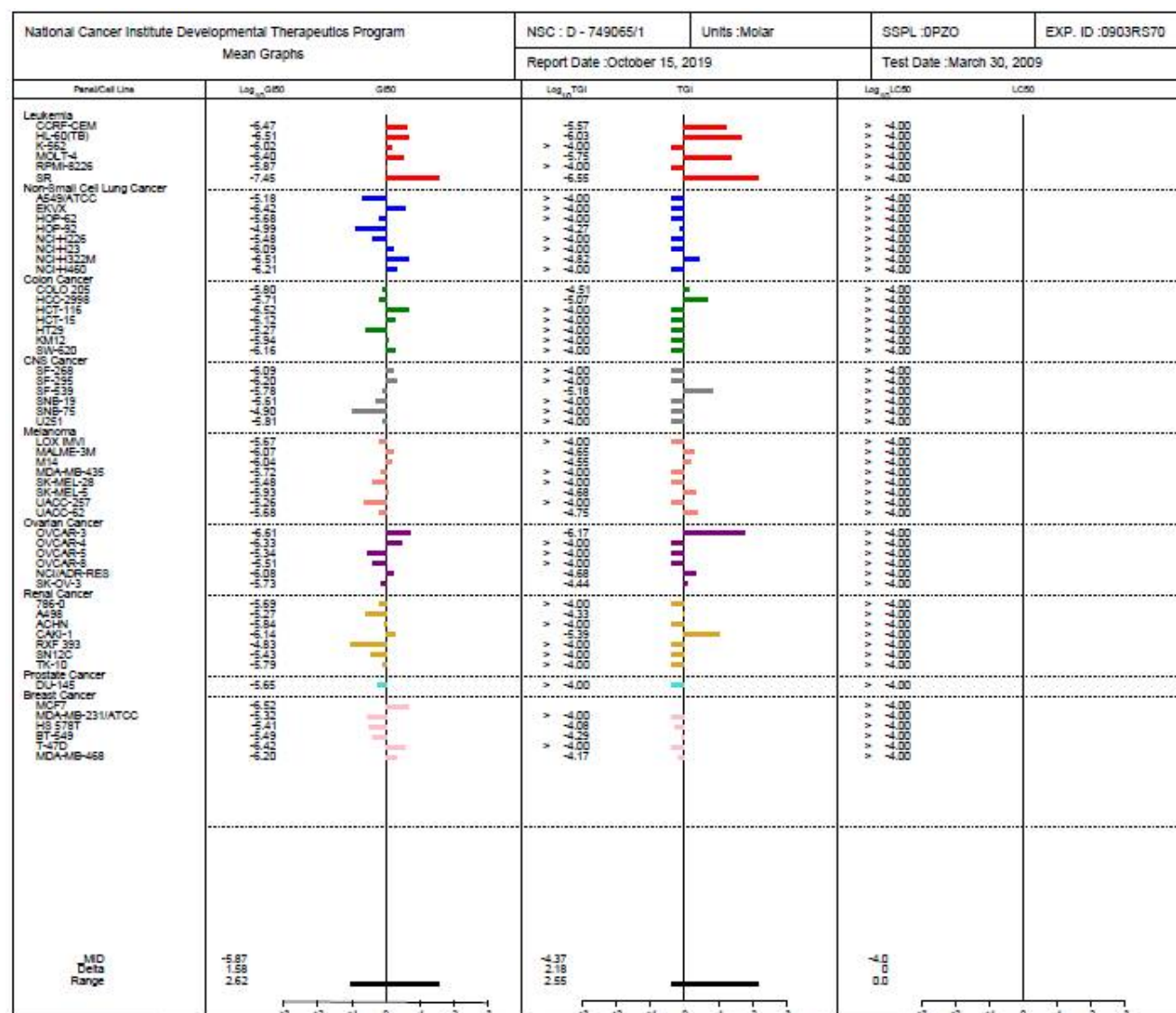
Протокол скринінгу (№ 2) протипухлинної активності сполуки 7.40



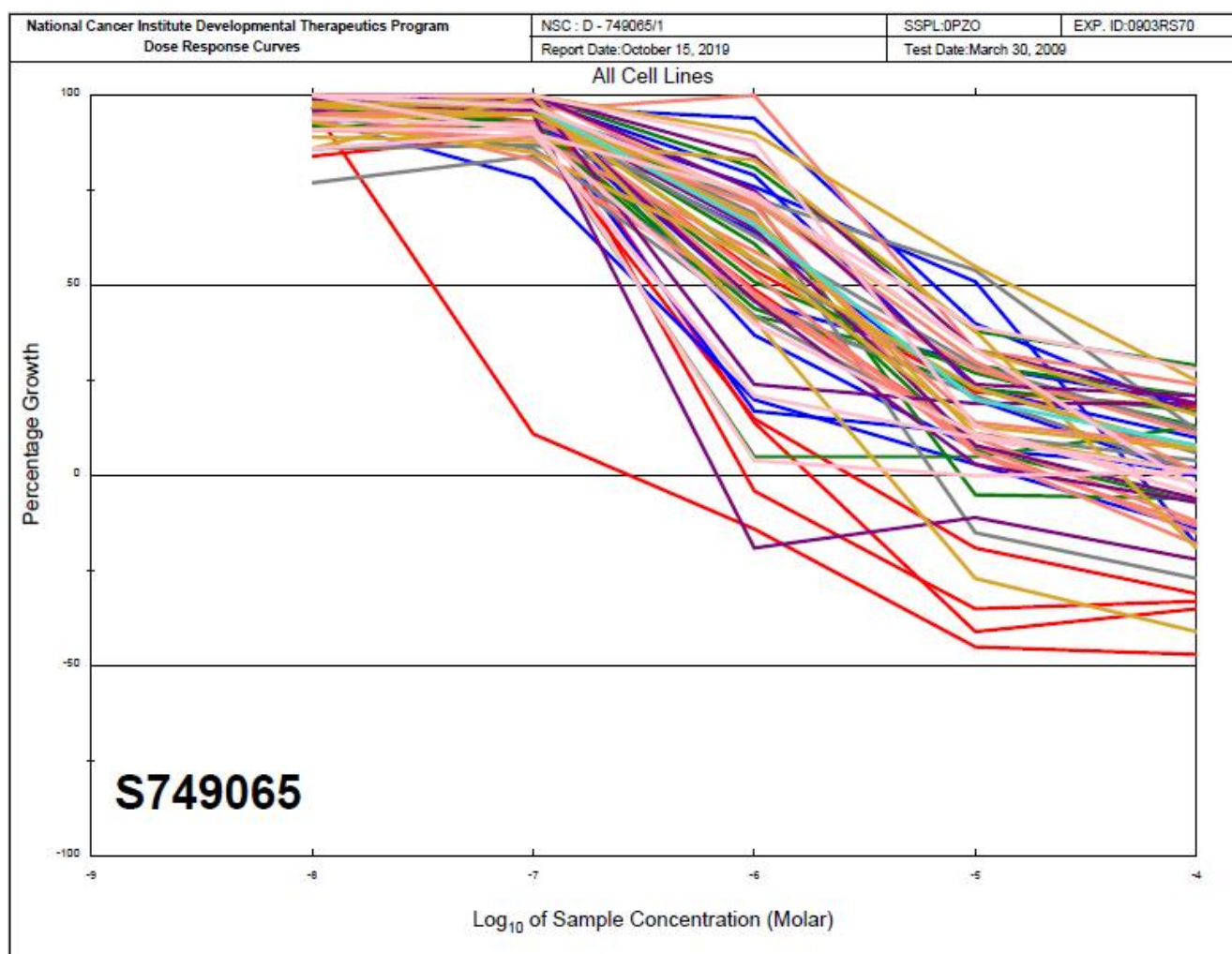
Протокол скринінгу (№ 2) протипухлинної активності сполуки 7.40

National Cancer Institute Developmental Therapeutics Program In-Vitro Testing Results																
NSC : D - 749065 / 1			Experiment ID : D903R870					Test Type : 08			Units : Molar					
Report Date : October 15, 2019			Test Date : March 30, 2009					QNS :			MC :					
COMI : Les-772 (59557)			Stain Reagent : SRB Dual-Pass Related					SSPL : DPZO								
Log10 Concentration																
Panel/Cell Line	Time	Zero	Ctrl	-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0	-8.0	-7.0	-6.0	-5.0	-4.0	GI50	TGI	LC50
Leukemia																
CCRF-CEM	0.546	1.805	1.452	1.510	0.706	0.522	0.447		94	90	15	-19	-31	3.39E-7	2.70E-6	> 1.00E-4
HL-60(TB)	0.592	1.249	1.274	1.253	0.571	0.393	0.395		104	101	-4	-35	-33	3.06E-7	9.23E-7	> 1.00E-4
K-562	0.295	1.580	1.549	1.465	0.903	0.390	0.275		107	93	49	10	1	9.59E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MOLT-4	0.657	1.771	1.904	1.519	0.517	0.393	0.432		112	104	14	-41	-35	3.97E-7	1.77E-6	> 1.00E-4
RPMB-8226	0.536	1.584	1.900	1.523	1.313	0.509	0.886		101	95	54	22	15	1.35E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SR	0.252	0.541	0.532	0.293	0.227	0.144	0.140		97	11	-14	-45	-47	3.51E-8	2.62E-7	> 1.00E-4
Non-Small Cell Lung Cancer																
A549/ATCC	0.291	1.457	1.431	1.453	1.415	0.771	0.479		95	97	94	40	15	5.55E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
ERVK	0.353	1.175	1.155	1.139	0.495	0.441	0.357		99	95	17	11		3.52E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HOP-62	0.509	1.415	1.351	1.352	1.090	0.590	0.513		95	93	64	20		2.07E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HOP-92	0.572	1.434	1.425	1.414	1.299	1.159	0.711		99	95	75	51	-15	1.03E-5	5.42E-5	> 1.00E-4
NCI-H226	0.550	1.355	1.313	1.359	1.204	0.751	0.652		93	99	79	23	10	3.30E-6	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H23	0.323	1.155	1.100	1.131	0.702	0.551	0.450		93	97	45	29	19	5.19E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCI-H22M	0.505	1.235	1.197	1.051	0.553	0.531	0.437		94	75	20	3	-14	3.05E-7	1.53E-5	> 1.00E-4
NCI-H460	0.203	1.925	1.947	1.930	0.835	0.331	0.233		101	100	37	7	2	5.19E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Colon Cancer																
COLO 205	0.294	1.113	1.149	1.053	0.791	0.352	0.272		104	95	51	7	-7	1.55E-5	3.05E-5	> 1.00E-4
HCC-2998	1.219	3.023	3.011	2.939	2.522	1.155	1.142		99	95	72	-5	-5	1.94E-5	5.55E-5	> 1.00E-4
HCT-115	0.155	1.540	1.493	1.421	0.252	0.251	0.350		97	91	5	5	13	3.02E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HCT-15	0.459	2.354	2.312	2.243	1.320	0.505	0.795		95	93	44	23	17	7.67E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HT29	0.210	1.475	1.517	1.451	1.231	0.595	0.579		103	100	51	35	25	5.31E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
KM12	0.155	0.515	0.514	0.752	0.511	0.359	0.272		100	95	51	27	13	1.14E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SW-620	0.213	1.453	1.359	1.355	0.739	0.575	0.470		92	92	42	29	21	5.94E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CNS Cancer																
SF-295	0.397	1.147	1.111	1.041	0.744	0.553	0.403		95	95	45	21	1	5.05E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SF-295	0.731	2.557	2.225	2.357	1.535	0.937	0.504		77	84	42	11	4	5.35E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SF-539	0.512	1.559	1.534	1.517	1.330	0.520	0.445		95	95	59	-15	-27	1.57E-5	5.50E-5	> 1.00E-4
SNB-19	0.717	1.502	1.451	1.451	1.214	0.945	0.505		97	95	53	29	12	2.45E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SNB-75	0.557	1.255	1.157	1.157	1.055	0.505	0.544		95	87	73	54	12	1.25E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
U251	0.255	1.411	1.355	1.351	0.520	0.550	0.353		95	95	55	23	5	1.55E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Melanoma																
LOX (MV)	0.274	1.591	1.597	1.551	1.152	0.454	0.374		100	95	57	14	5	2.13E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MALME-3M	0.555	1.105	1.091	1.010	0.515	0.501	0.471		97	93	47	5	-15	5.43E-7	2.23E-5	> 1.00E-4
M14	0.243	1.002	0.949	0.959	0.507	0.315	0.215		93	95	45	10	-12	9.07E-7	2.54E-5	> 1.00E-4
MDA-MB-435	0.372	1.559	1.731	1.709	1.250	0.793	0.532		91	89	59	25	11	1.92E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-25	0.515	1.550	1.555	1.575	1.379	0.937	0.521		101	100	72	30	1	3.33E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SK-MEL-5	0.345	2.157	2.115	2.054	1.312	0.455	0.259		95	95	53	5	-13	1.15E-5	2.05E-5	> 1.00E-4
UACC-257	0.551	1.702	1.555	1.555	1.300	1.017	0.525		95	95	100	33	24	5.55E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
UACC-62	0.559	2.223	2.055	2.104	1.733	0.555	0.451		91	93	71	5	-15	2.05E-5	1.75E-5	> 1.00E-4
Ovarian Cancer																
OVCAR-3	0.352	0.900	0.595	0.573	0.254	0.322	0.254		99	95	-19	-11	-22	2.45E-7	5.52E-7	> 1.00E-4
OVCAR-4	0.344	1.139	1.170	1.154	0.535	0.495	0.457		104	102	24	19	19	4.54E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-5	0.351	0.954	0.977	0.959	0.557	0.555	0.473		104	101	54	33	19	4.57E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
OVCAR-6	0.454	2.179	2.115	2.213	1.755	0.570	0.532		95	102	75	24	21	3.10E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
NCIADR-RES	0.511	1.711	1.735	1.595	1.059	0.549	0.475		102	99	45	3	-7	5.30E-7	2.07E-5	> 1.00E-4
SK-OV-3	0.475	1.073	1.055	1.051	0.555	0.520	0.447		104	95	55	5	-5	1.54E-5	3.50E-5	> 1.00E-4
Renal Cancer																
785-O	0.554	2.057	1.975	1.952	1.590	0.744	0.593		94	95	55	11	1	2.05E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
A-495	0.109	1.732	1.553	1.550	1.512	1.257	0.530		89	85	53	35	-19	5.32E-5	4.55E-5	> 1.00E-4
ACHN	0.252	1.253	1.237	1.225	0.535	0.415	0.355		95	97	57	13	7	1.44E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
CAH-1	0.512	1.557	1.502	1.545	1.153	0.450	0.352		95	104	41	-27	-41	7.23E-7	4.05E-5	> 1.00E-4
RXJF 393	0.325	0.775	0.755	0.511	0.754	0.575	0.441		97	107	50	55	25	1.47E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
SN12C	0.403	1.535	1.457	1.475	1.233	0.773	0.595		97	95	73	33	15	3.74E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
TX-10	0.555	1.557	1.525	1.445	1.173	0.535	0.579		93	55	57	23	7	1.52E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Prostate Cancer																
DU-145	0.454	1.455	1.517	1.457	1.135	0.555	0.540		103	97	55	20	5	2.24E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
Breast Cancer																
MCF7	0.305	1.707	1.523	1.500	0.357	0.303	0.323		94	92	4		1	3.01E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-231/ATCC	0.450	1.201	1.214	1.175	0.559	0.744	0.550		102	97	73	39	25	4.75E-5	> 1.00E-4	> 1.00E-4
HS 578T	0.450	0.944	0.951	0.901	0.525	0.543	0.475		95	90	74	33	-3	3.57E-5	5.24E-5	> 1.00E-4
BT-549	1.054	1.554	2.052	2.057	1.575	1.212	1.035		111	105	55	13	-5	3.22E-5	5.15E-5	> 1.00E-4
T-47D	0.445	1.033	1.035	0.972	0.555	0.503	0.451		101	95	21	10	1	3.77E-7	> 1.00E-4	> 1.00E-4
MDA-MB-468	0.521	1.555	1.475	1.475	0.537	0.539	0.509		91	91	40	11	-2	5.31E-7	5.75E-5	> 1.00E-4

Протокол скринінгу (№ 2) протипухлинної активності сполуки 7.40



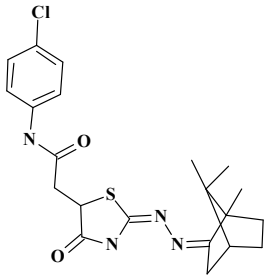
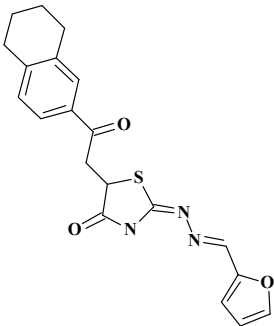
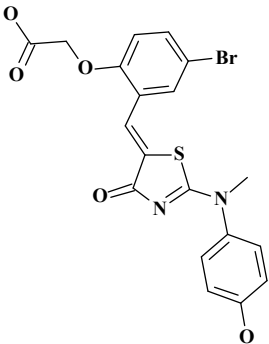
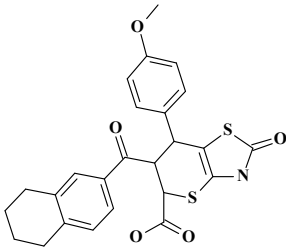
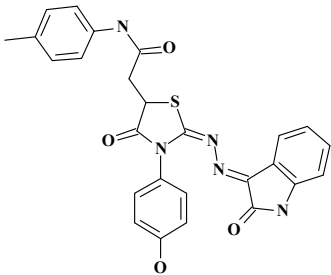
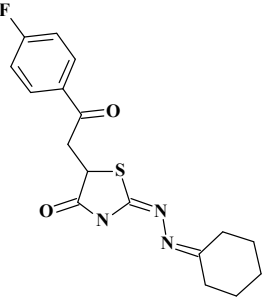
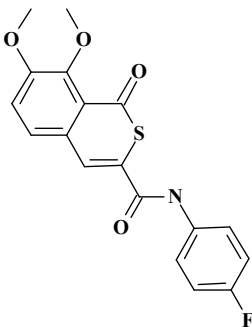
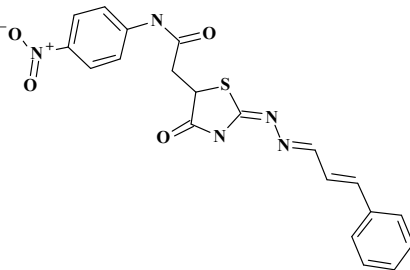
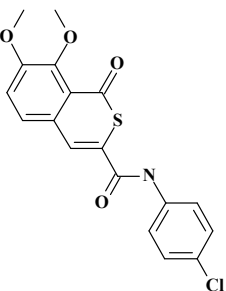
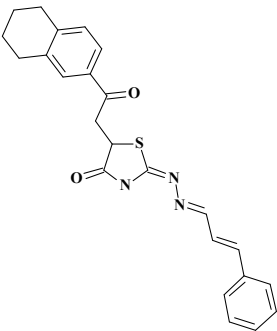
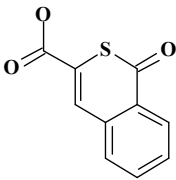
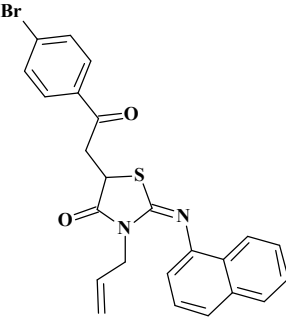
Протокол скринінгу (№ 2) протипухлинної активності сполуки 7.40



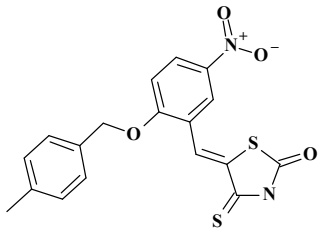
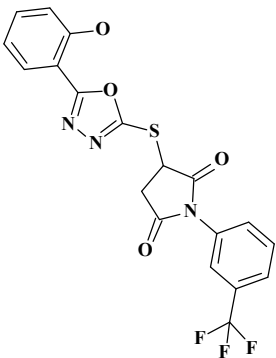
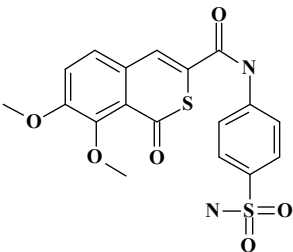
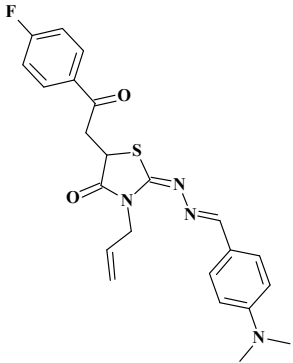
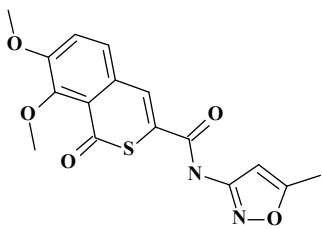
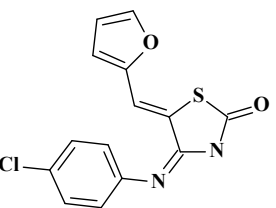
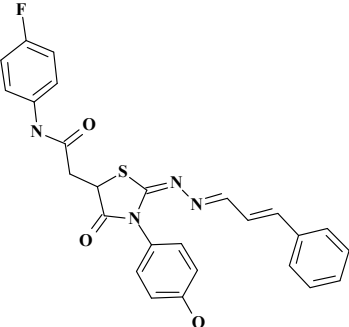
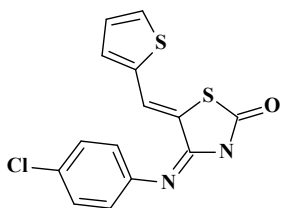
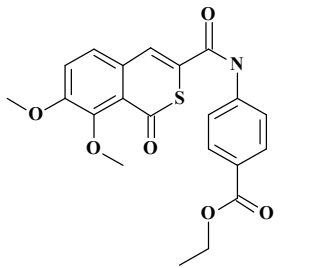
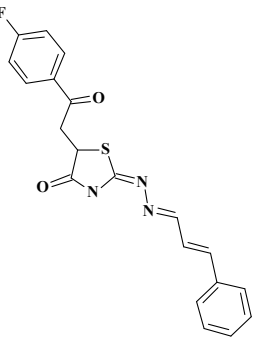
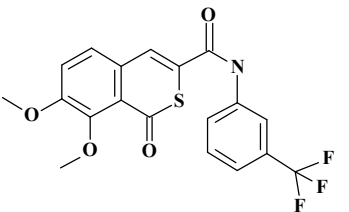
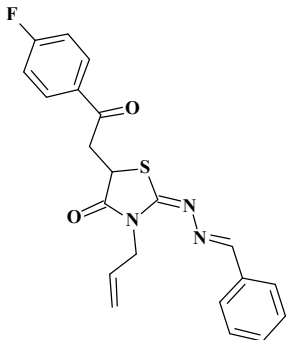
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
229		1656		316		1721	
230		1715		772		1739	
799		1747		827		1753	

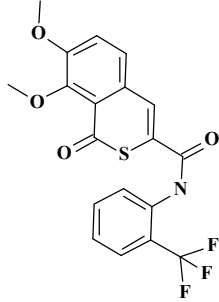
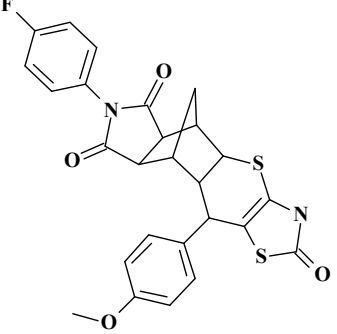
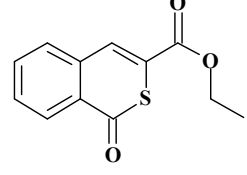
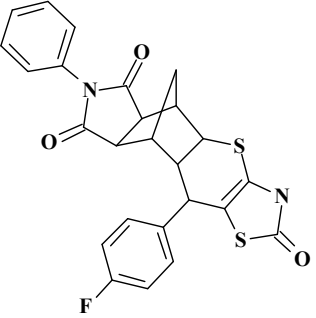
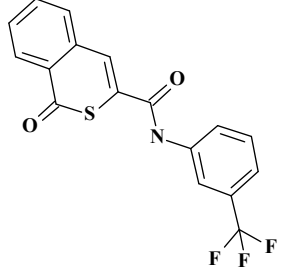
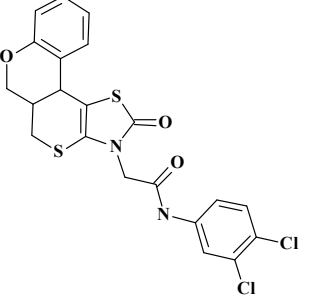
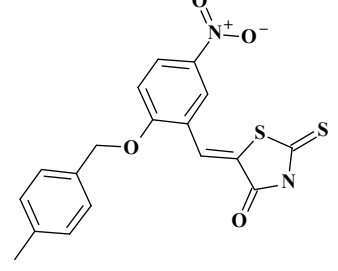
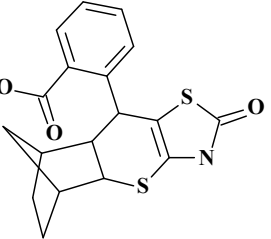
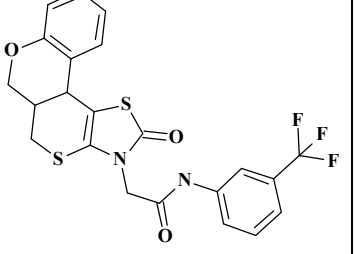
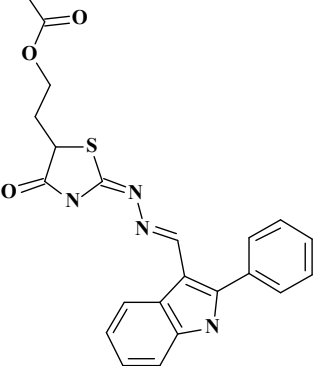
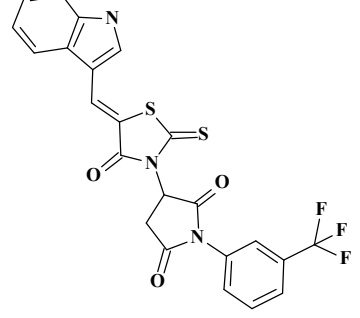
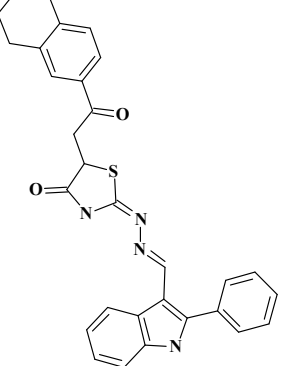
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
955		1767		1029		1844	
1048		1890		1259		1906	
1262		1908		1266		1930	

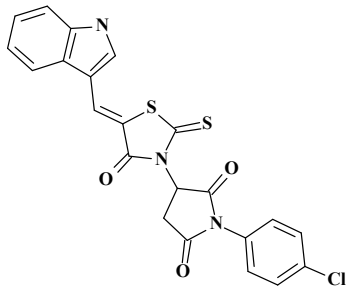
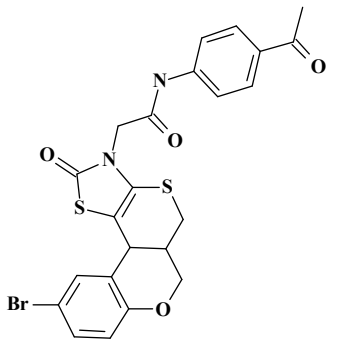
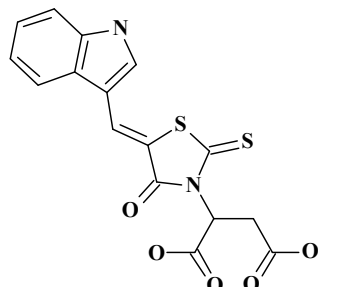
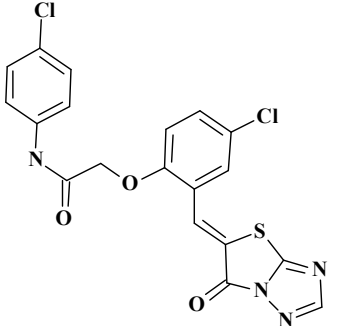
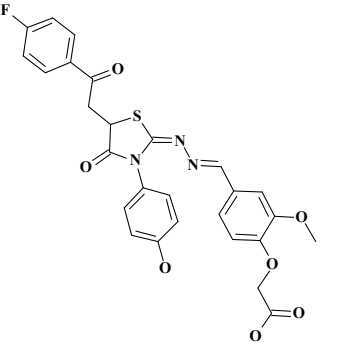
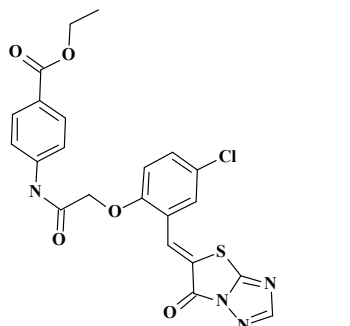
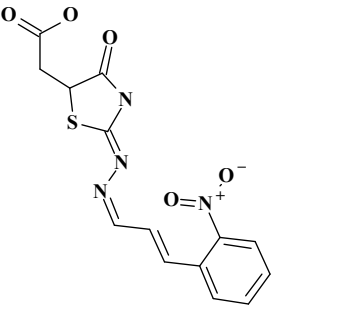
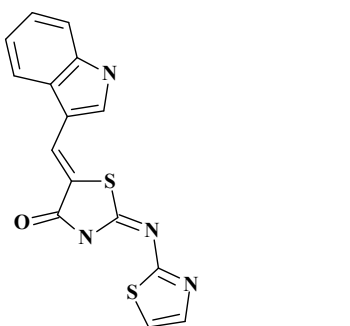
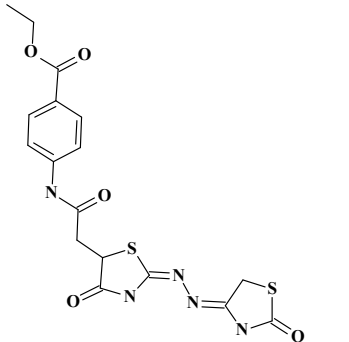
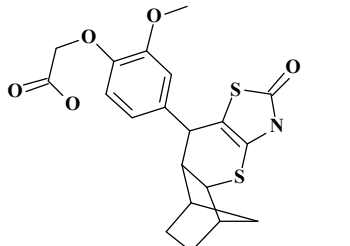
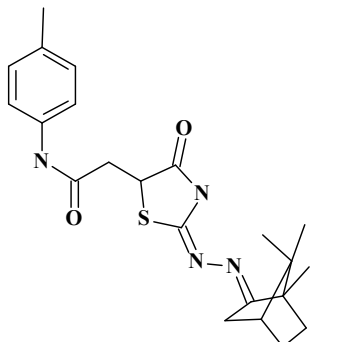
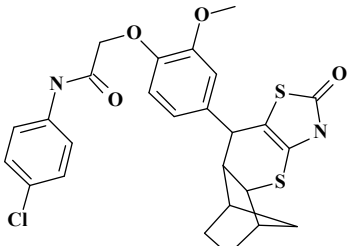
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
1353		1935		1403		2019	
1404		2025		1405		2028	
1411		2034		1491		2043	

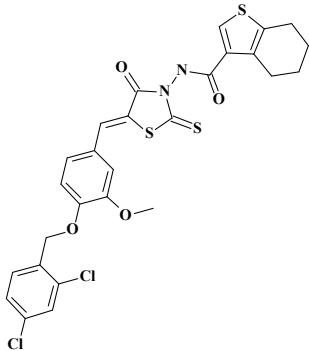
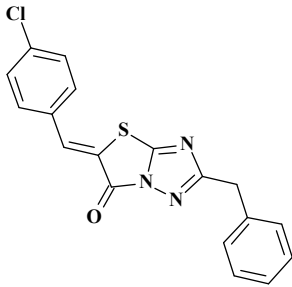
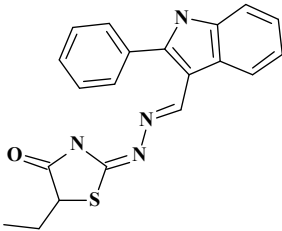
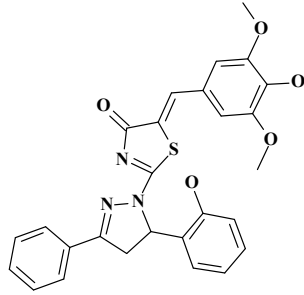
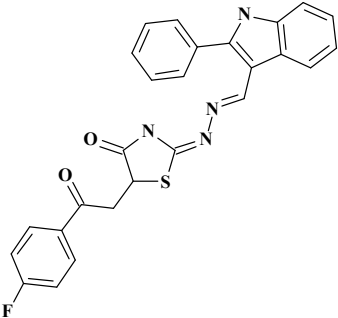
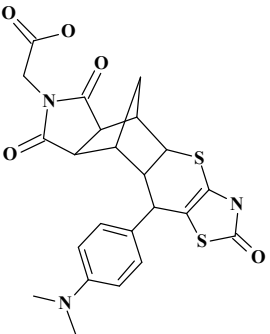
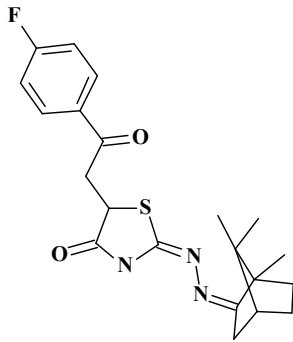
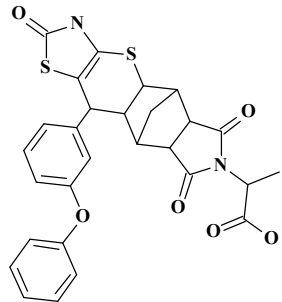
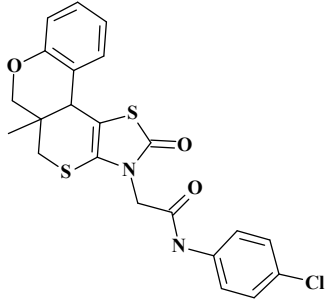
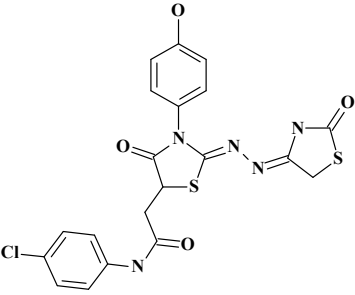
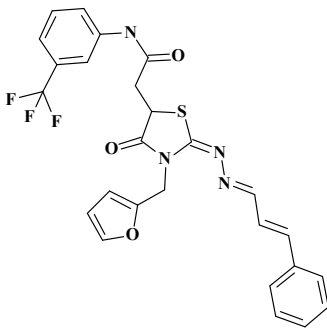
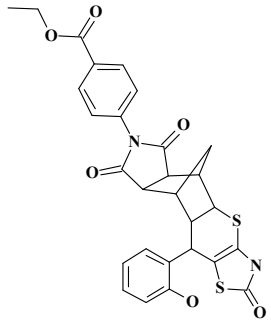
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
1503		2136		1505		2150	
1538		2194		1569		2198	
2222		2752		2227		2780	

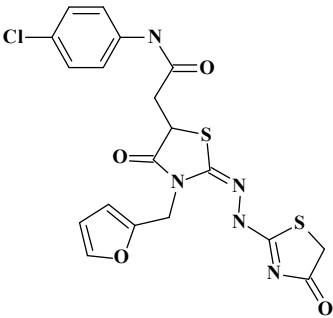
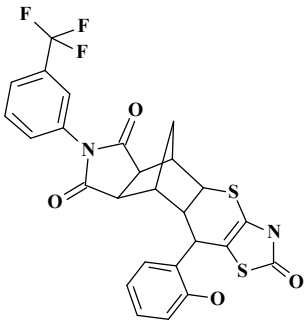
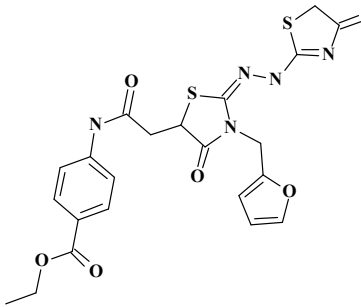
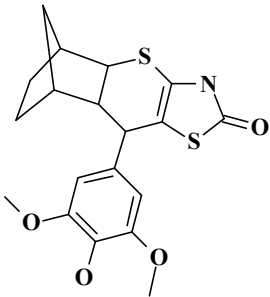
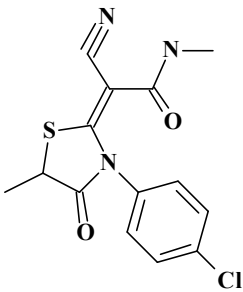
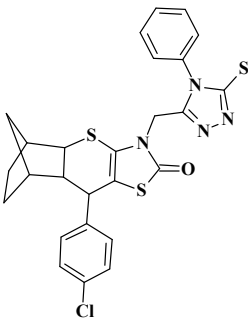
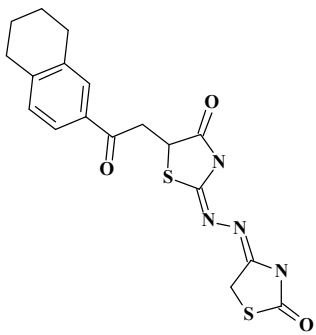
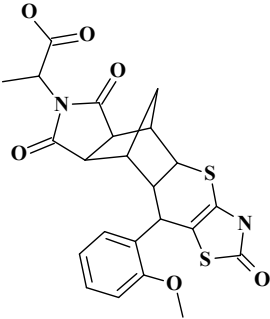
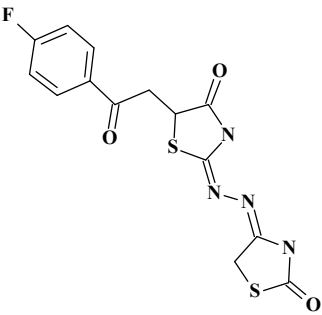
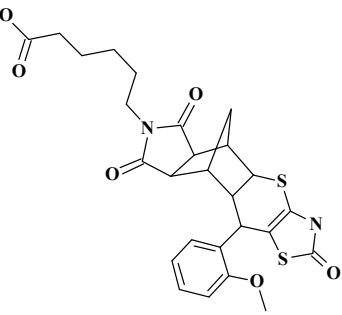
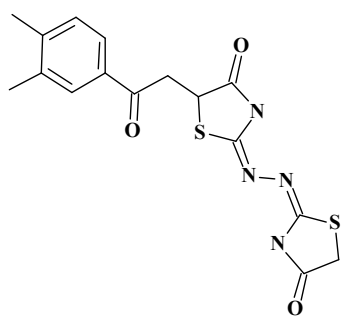
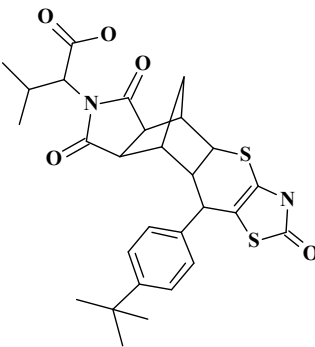
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
2229		2783		2283		2785	
2289		2798		2360		2808	
2367		2813		2379		2815	

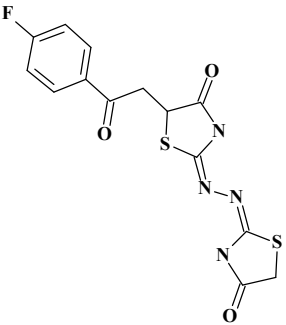
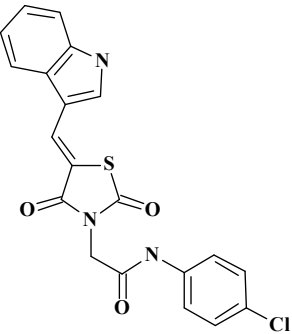
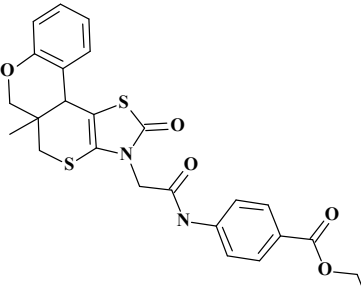
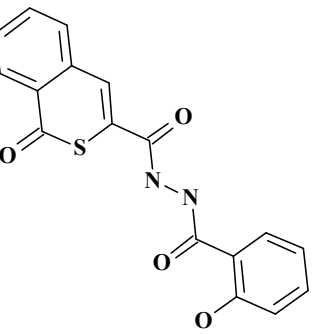
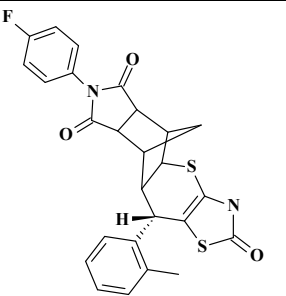
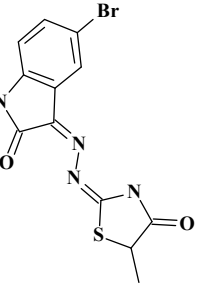
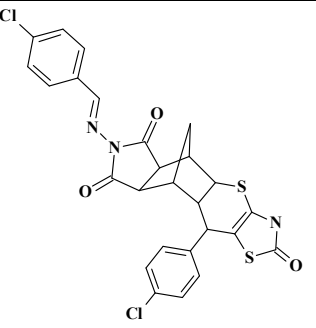
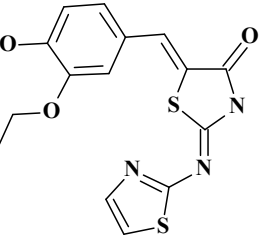
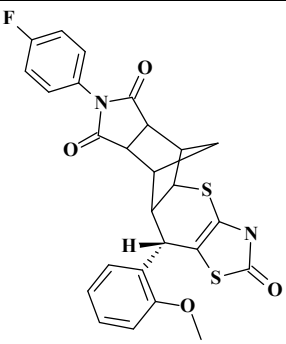
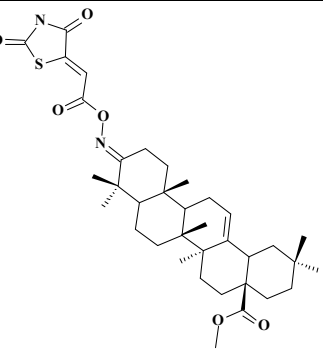
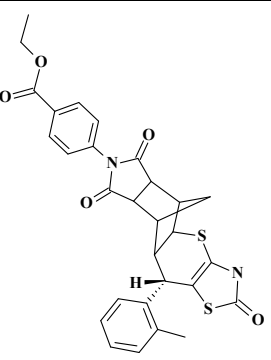
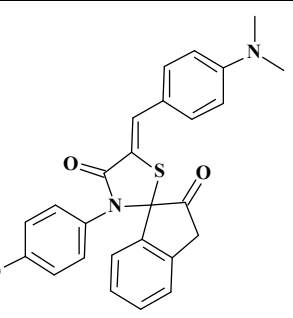
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
2382		2829		2446		2925	
2447		2948		2543		2954	
2557		2956		2602		2975	

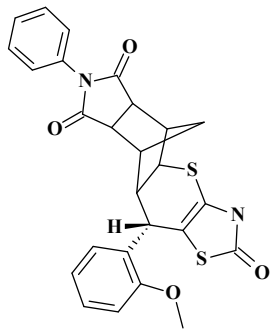
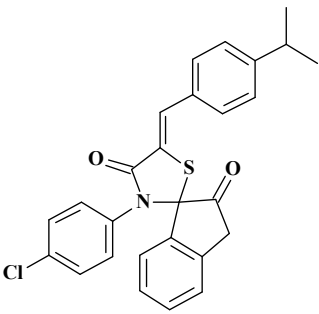
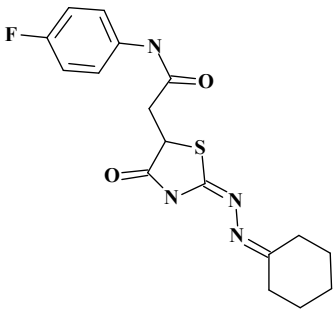
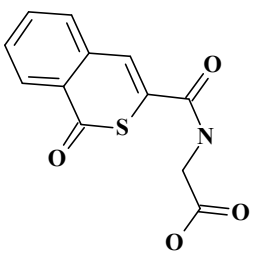
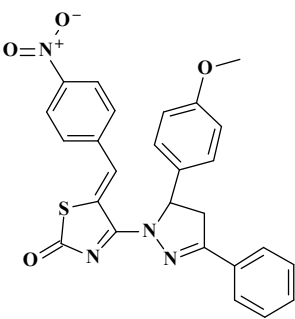
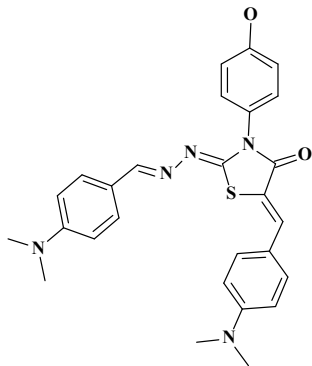
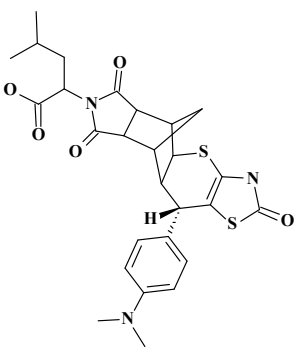
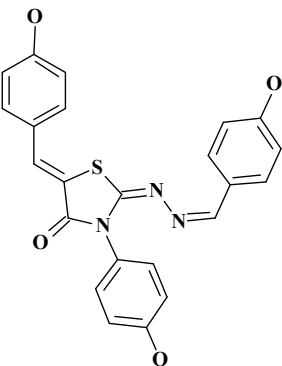
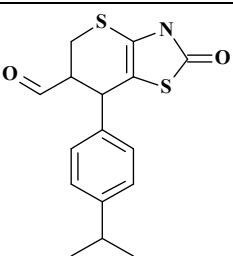
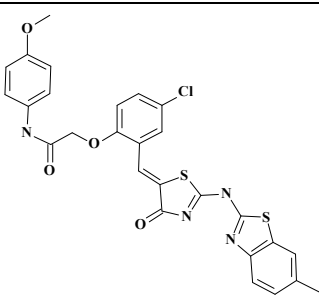
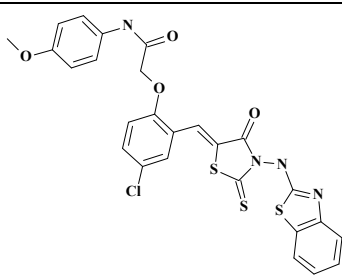
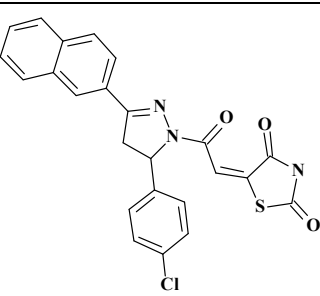
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
2627		2976		2628		2980	
2690		2990		2732		3002	
2737		3008		2742		3019	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
2743		3033		2751		3052	
3058		3424		3070		3440	
3086		3447		3088		3466	

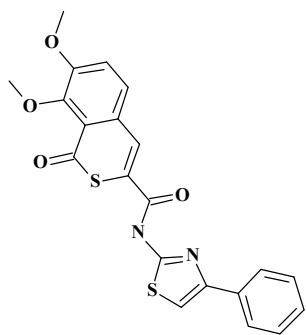
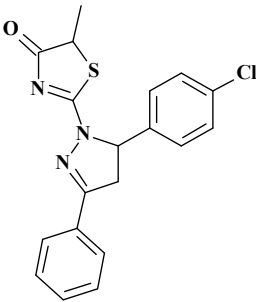
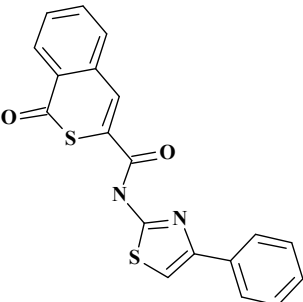
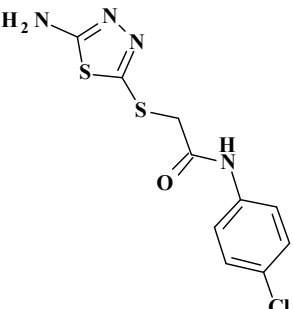
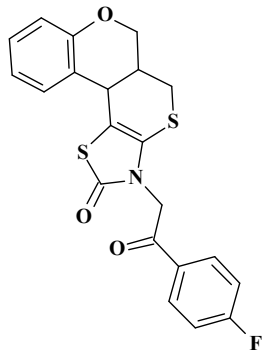
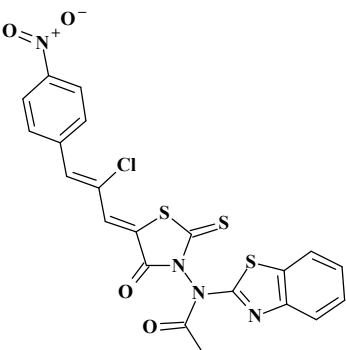
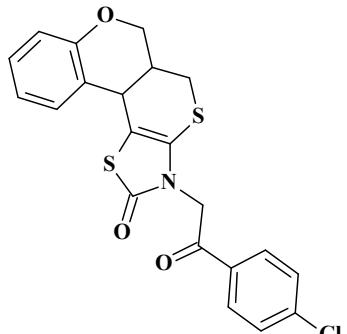
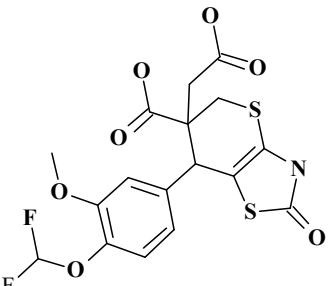
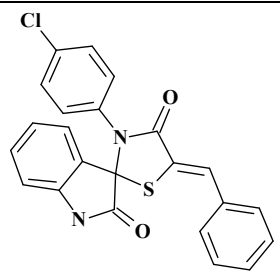
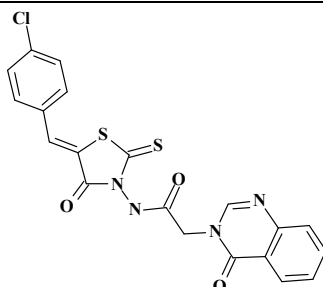
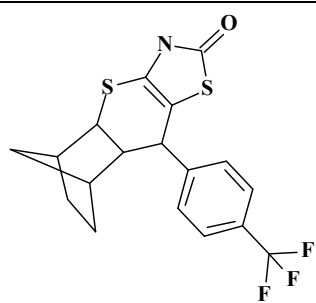
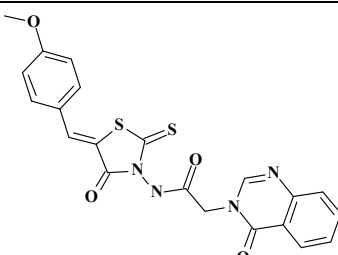
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3089		3467		3094		3475	
3120		3481		3144		3497	
3157		3605		3166		3623	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3186		3632		3201		3640	
3219		3658		3238		3661	
3247		3701		3249		3713	

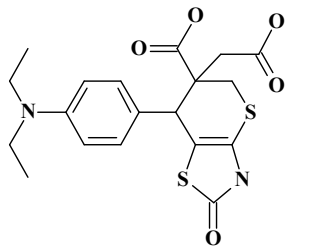
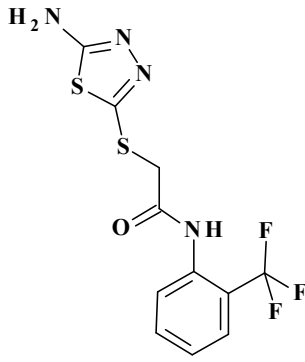
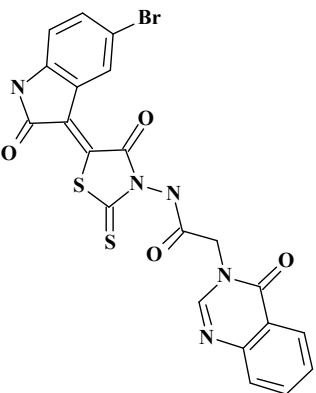
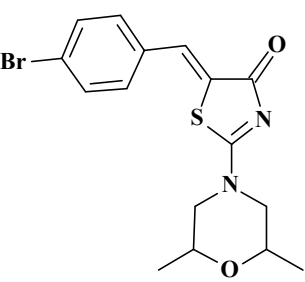
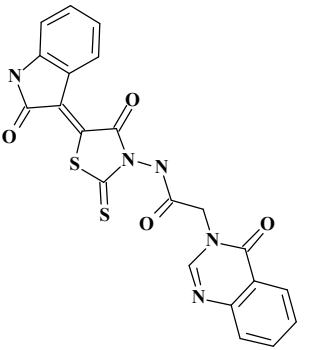
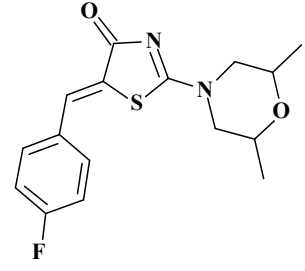
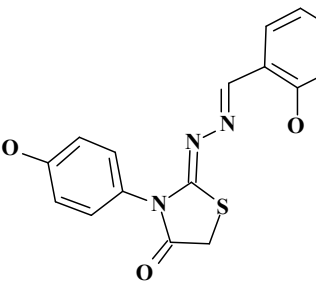
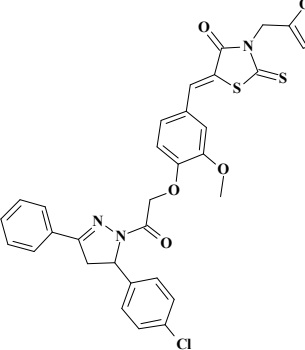
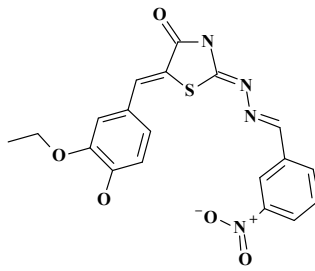
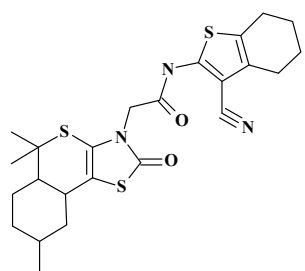
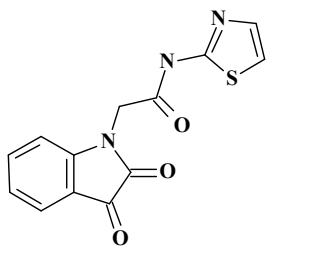
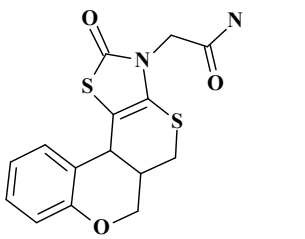
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3266		3719		3302		3723	
3315		3731		3317		3735	
3390		3746		3416		3747	

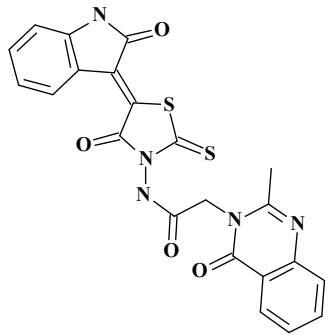
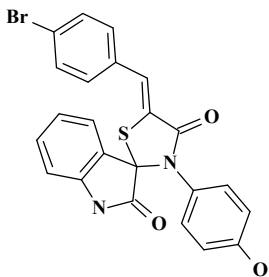
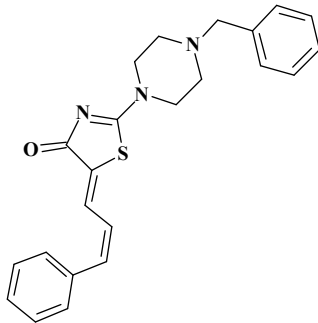
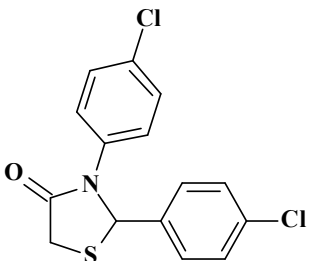
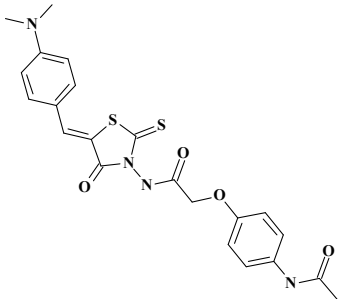
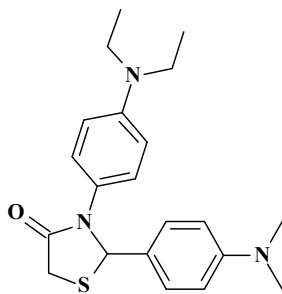
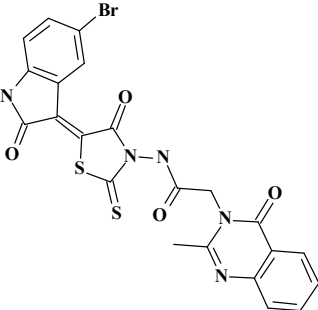
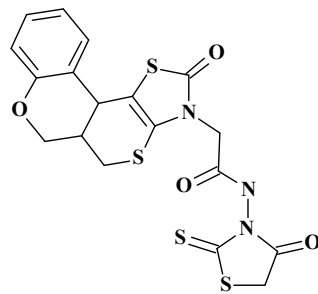
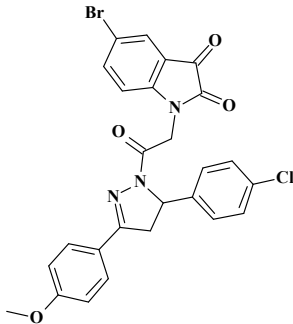
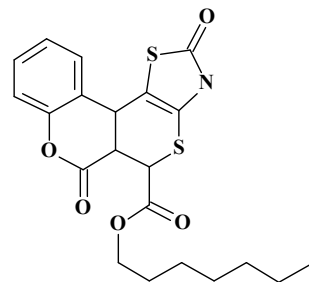
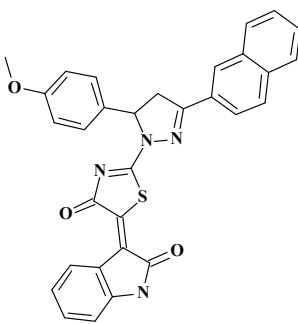
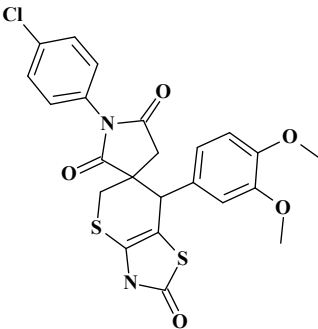
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3748		3910		3751		3914	
3752		3916		3756		3917	
3761		3951		3769		3952	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3770		3953		3783		3975	
3784		3976		3793		3977	
3794		3997		3801		3998	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3825		4015		3831		4016	
3834		4017		3849		4032	
3879		4033		3882		4040	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
3887		4042		3905		4044	
3906		4049		3909		4076	
4339		4603		4341		4604	

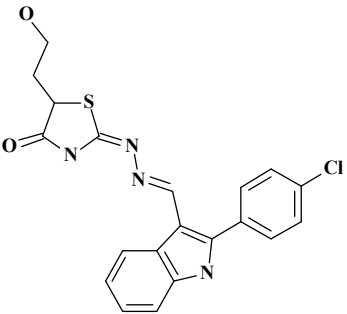
Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
4342		4605		4353		4606	
4354		4614		4366		4615	
4376		4620		4377		4477	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
4478		4505		4575		4576	
4577		4579		4580		4595	
4598		4599		4600		4601	

Структури сполук, відібраних для QSAR-аналізу

Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура	Сп-ка	Структура
4602							

Значення найважливіших дескрипторів розрахованих для методів *Random Forest* та регресії Гаусівських процесів

Сп-ки	Дескриптори					Сп-ки	Дескриптори				
	GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m		GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m
229	0.869	3.857	-8.56432	-1.64	0.11	1656	0.819	3.901	-9.0129	-1.345	0.302
230	0.954	3.85	-8.78492	-1.424	0.125	1715	0.698	3.71	-8.68192	-0.827	0.14
316	0.928	3.88	-8.28744	-2.629	0.047	1721	1.427	4.013	-8.44684	-1.661	0.058
772	0.816	3.904	-9.36229	-1.353	0.241	1739	1.041	4.014	-8.3852	-1.917	0.172
799	1.018	3.936	-8.86908	-1.024	0.123	1747	0.836	3.904	-8.37443	-2.357	0.101
827	0.767	3.832	-8.84776	-2.02	0.111	1753	0.889	3.82	-9.11699	-1.485	0.097
955	0.93	3.936	-8.88047	-1.369	0.071	1767	1.011	3.92	-8.60825	-1.657	0.099
1029	0.948	3.874	-8.83142	-1.618	0.245	1844	0.994	3.961	-8.27535	-2.178	0.234
1048	1.083	3.894	-8.64401	-2.166	0.073	1890	0.836	3.821	-8.82727	-1.307	0.103
1259	0.773	3.917	-8.77803	-1.613	0.156	1906	0.911	3.834	-8.74237	-1.593	0.112
1262	0.914	3.917	-8.79386	-1.657	0.158	1908	1.171	3.922	-8.558	-2.171	0.09
1266	1.294	3.895	-9.04327	-0.538	0.773	1930	1.085	4.014	-8.56116	-1.938	0.141
1353	0.965	3.889	-9.24795	-1.51	0.16	1935	0.86	3.86	-9.16354	-1.791	0.183
1403	0.938	3.926	-8.86646	-2.008	0.23	2019	0.909	3.844	-8.13763	-2.23	0.1
1404	0.87	3.914	-8.8585	-1.53	0.185	2025	0.766	3.831	-8.76844	-1.255	0.201
1405	0.746	3.846	-8.54905	-2.423	0.109	2028	0.767	3.852	-8.87763	-1.022	0.249
1411	0.871	3.919	-8.75195	-1.779	0.197	2034	0.873	3.835	-8.59768	-1.582	0.133
1491	0.826	3.919	-9.00754	-1.637	0.271	2043	0.901	3.832	-8.67638	-1.471	0.113
1503	1.003	3.919	-8.78189	-1.935	0.28	2136	0.702	4.02	-8.43689	-0.72	0.185
1505	1.064	3.897	-9.16539	-1.257	0.4	2150	0.793	4.019	-8.54098	-0.496	0.196
1538	0.917	3.906	-9.22709	-1.542	0.177	2194	1.014	3.928	-8.33672	-1.875	0.176
1569	1.069	3.887	-9.06343	-1.374	0.162	2198	0.986	3.983	-8.1814	-0.496	0.258

Значення найважливіших дескрипторів розрахованих для методів *Random Forest* та регресії Гаусівських процесів

Сп-ки	Дескриптори					Сп-ки	Дескриптори				
	GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m		GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m
2222	0.986	3.928	-8.37425	-2.1	0.213	2752	0.628	4.058	-8.12434	-1.95	0.06
2227	0.836	4.026	-8.58594	-1.872	0.254	2780	1.031	4.06	-8.06523	-2.554	0.081
2229	0.901	4.026	-8.55371	-1.79	0.232	2783	1.082	3.936	-8.40259	-2.276	0.233
2283	1.229	4.024	-8.48443	-1.084	0.935	2785	1.245	3.877	-8.71753	-1.571	0.149
2289	0.972	3.863	-8.92774	-1.703	0.149	2798	1.133	3.879	-9.1918	-1.634	0.146
2360	0.793	3.855	-9.111	-0.722	0.219	2808	1.398	4.024	-8.25227	-1.352	0.192
2367	1.015	3.823	-8.88265	-1.612	0.11	2813	0.832	3.978	-8.37886	-0.712	0.144
2379	0.742	3.937	-8.80332	-1.76	0.057	2815	1.058	3.98	-8.36972	-1.749	0.128
2382	1.109	3.923	-8.863	-2.889	0.101	2829	1.332	3.886	-8.90242	-1.574	0.134
2446	1.133	4.058	-8.10738	-1.661	0.063	2925	0.896	3.914	-8.60192	-2.561	0.084
2447	0.71	4.059	-8.20683	-1.902	0.086	2948	0.742	4.015	-8.49561	-0.497	0.162
2543	0.74	3.937	-8.80583	-0.977	0.07	2954	0.699	4.017	-8.44955	-0.872	0.171
2557	0.875	3.944	-8.31481	-2.029	0.21	2956	0.728	3.832	-8.82877	-1.561	0.11
2602	1.013	3.839	-8.57305	-2.2	0.149	2975	0.883	4.022	-8.65786	-0.811	0.175
2627	0.799	3.799	-9.23395	-1.53	0.223	2976	0.731	4.021	-8.64172	-0.628	0.209
2628	0.712	3.827	-8.87789	-1.272	0.14	2980	0.905	3.979	-8.29657	-1.195	0.172
2690	0.733	3.841	-9.19701	-0.982	0.19	2990	0.958	3.986	-8.15303	-1.996	0.203
2732	1.131	3.92	-8.8402	-1.481	0.124	3002	0.761	4.015	-8.37272	-0.882	0.204
2737	0.822	3.82	-8.91578	-0.842	0.158	3008	0.822	4.015	-8.33743	-1.02	0.148
2742	0.729	3.875	-8.54259	-1.117	0.125	3019	0.9	4.023	-8.43081	-0.579	0.127
2743	0.822	3.819	-8.63017	-0.808	0.184	3033	0.996	4.024	-8.60224	-1.751	0.218
2751	0.7	3.945	-8.5825	-2.207	0.174	3052	0.628	4.058	-9.11113	-1.447	0.174

Значення найважливіших дескрипторів розрахованих для методів *Random Forest* та регресії Гаусівських процесів

Сп-ки	Дескриптори					Сп-ки	Дескриптори				
	GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m		GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m
3058	0.709	4.024	-8.61554	-0.802	0.184	3424	1.162	3.892	-8.83526	-0.826	0.354
3070	0.905	4.013	-8.57831	-0.095	0.176	3440	1.096	3.856	-8.49463	-1.178	0.184
3086	0.771	4.02	-8.42819	-0.708	0.176	3447	0.684	4.037	-9.28605	-1.561	0.067
3088	0.813	4.026	-8.63292	-1.602	0.147	3466	1.168	3.961	-8.18709	-2.374	0.114
3089	1.008	4.02	-8.38305	-0.89	0.174	3467	1.301	3.965	-8.71301	-2.291	0.124
3094	0.718	3.786	-8.84665	-0.05	0.144	3475	0.857	3.898	-9.13962	-0.745	0.561
3120	0.707	3.939	-9.20617	0.369	0.099	3481	1.146	3.89	-7.93765	-3.247	0.033
3144	0.969	4.017	-8.48642	-2.209	0.14	3497	0.927	3.877	-8.3304	-2.034	0.057
3157	1.391	3.918	-8.36158	-0.348	0.207	3605	1.23	3.979	-8.91689	-2.632	0.124
3166	1.144	3.961	-8.76074	0.632	0.207	3623	0.801	4.027	-8.71799	-1.433	0.134
3186	1.047	3.822	-8.52221	-0.108	0.066	3632	0.815	3.9	-8.81079	-1.734	0.111
3201	1.391	3.912	-8.58214	0.578	0.086	3640	1.201	3.948	-8.39322	-3.067	0.068
3219	0.894	3.977	-8.06011	-0.848	0.21	3658	0.994	3.928	-8.34177	-1.755	0.259
3238	0.919	3.851	-8.38631	0.465	0.101	3661	0.758	3.918	-9.2186	-2.239	0.071
3247	1.035	3.945	-8.63964	0.039	0.082	3701	0.705	3.898	-9.09349	-2.162	0.055
3249	1.139	3.925	-8.39879	0.14	0.215	3713	0.793	3.912	-8.95232	-2.284	0.113
3266	1.017	3.923	-8.78833	-0.513	0.225	3719	0.749	3.898	-9.21661	-1.779	0.09
3302	1.321	3.911	-8.78145	-0.329	0.223	3723	1.109	3.789	-8.78858	-1.168	0.268
3315	0.901	3.93	-8.23204	0.665	0.206	3731	1.013	3.964	-9.22414	-1.926	0.448
3317	1.075	3.93	-8.31325	0.175	0.259	3735	0.89	3.922	-8.72518	-1.375	0.392
3390	1.264	3.959	-8.69741	0.475	0.139	3746	1.14	3.867	-8.83853	-1.82	0.235
3416	0.552	3.979	-8.42726	0.186	0.189	3747	1.09	3.868	-8.57299	-2.134	0.208

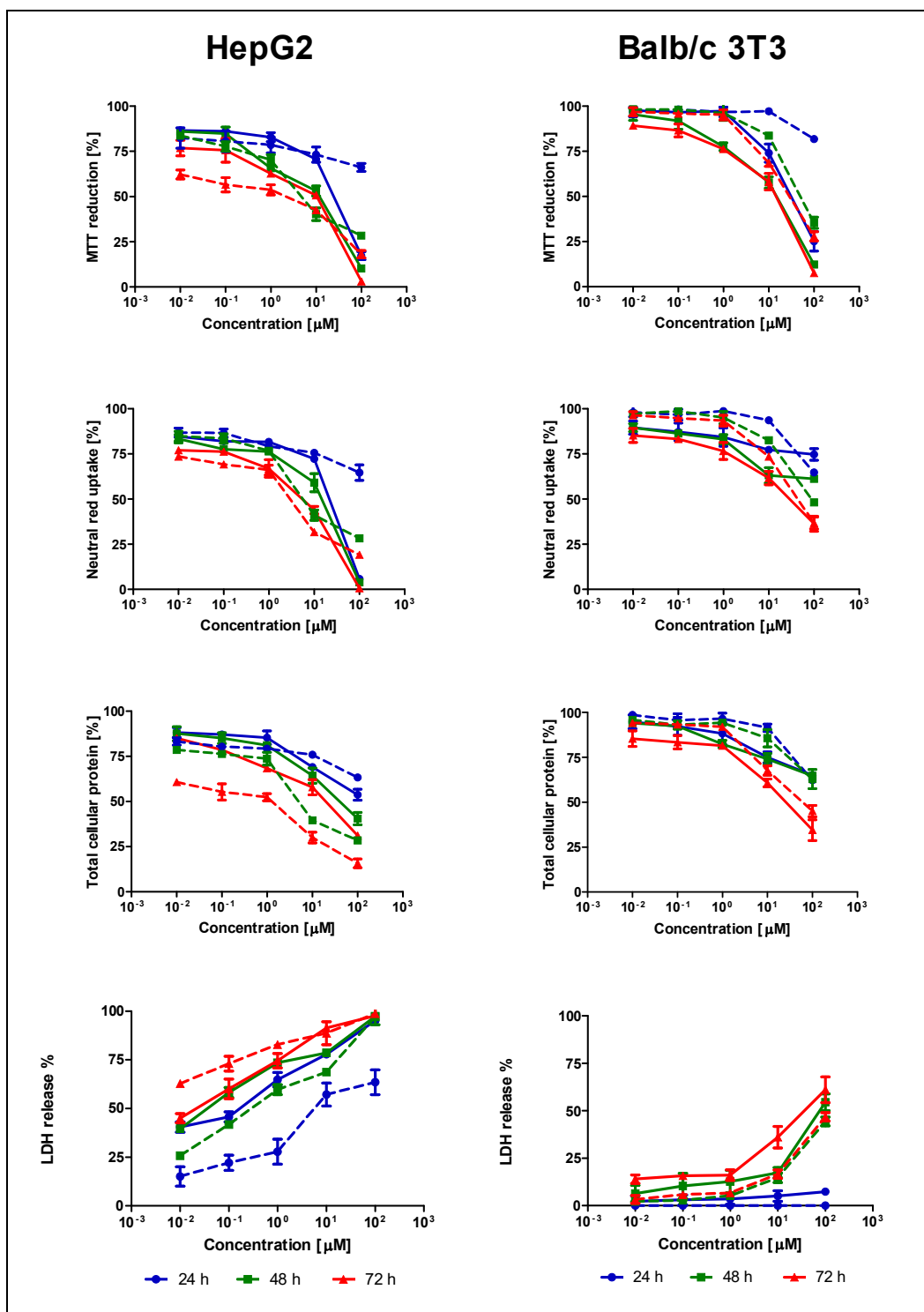
Значення найважливіших дескрипторів розрахованих для методів *Random Forest* та регресії Гаусівських процесів

Сп-ки	Дескриптори					Сп-ки	Дескриптори				
	GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m		GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m
3748	1.115	3.856	-9.2514	-1.018	0.421	3910	1.19	4.05	-8.54589	-1.957	0.289
3751	0.829	3.86	-9.16537	-1.539	0.216	3914	1.154	3.865	-9.13342	-1.266	0.234
3752	0.95	3.825	-8.15465	-1.2	0.144	3916	1.045	3.943	-8.78113	-2.483	0.106
3756	0.998	3.915	-8.79254	-2.178	0.156	3917	1.243	3.88	-8.23554	-2.786	0.103
3761	1.006	3.87	-8.64883	-2.014	0.186	3951	1.258	3.931	-8.26858	-2.276	0.149
3769	1.054	3.924	-8.37199	-1.514	0.42	3952	1.193	3.877	-8.71085	-1.227	0.207
3770	1.025	3.927	-8.27056	-1.317	0.262	3953	1.368	3.819	-8.71823	-1.448	0.31
3783	1.161	3.936	-8.87023	-1.458	0.396	3975	1.17	3.855	-8.89551	-1.516	0.133
3784	1.177	3.927	-8.75394	-1.449	0.277	3976	0.91	3.844	-8.95079	-1.468	0.099
3793	0.761	3.83	-8.63965	-1.27	0.105	3977	1.167	3.909	-8.67384	-3.314	0.119
3794	1.072	3.863	-8.56996	-1.575	0.135	3997	1.437	3.937	-8.11802	-2.575	0.173
3801	1.555	3.884	-9.02135	-1.029	0.206	3998	0.957	3.925	-8.17014	-1.65	0.305
3825	1.207	3.928	-8.96225	-1.726	0.33	4015	1.143	3.96	-8.59403	-1.611	0.178
3831	1.138	3.848	-8.70011	-2.273	0.064	4016	0.92	3.872	-9.03164	-1.181	0.254
3834	1.34	3.863	-8.36305	-2.725	0.171	4017	1.144	3.89	-8.2234	-2.235	0.077
3849	1.19	3.936	-8.84334	-1.728	0.388	4032	1.086	3.925	-8.28345	-1.695	0.244
3879	1.147	3.922	-8.74238	-2.573	0.265	4033	1.048	3.931	-8.69235	-2.127	0.204
3882	1.046	4.032	-8.57008	-2.406	0.057	4040	0.971	3.952	-8.6149	-1.468	0.196
3887	1.142	3.904	-9.08805	-2.322	0.102	4042	1.134	3.849	-8.73467	-1.355	0.41
3905	1.126	3.956	-8.24354	-1.922	0.151	4044	1.147	3.954	-8.25192	-1.759	0.155
3906	0.928	3.952	-8.53017	-1.638	0.139	4049	1.089	3.902	-8.49525	-1.446	0.105
3909	0.906	3.855	-8.83447	-2.074	0.105	4076	1.221	3.944	-8.76766	-1.473	0.118

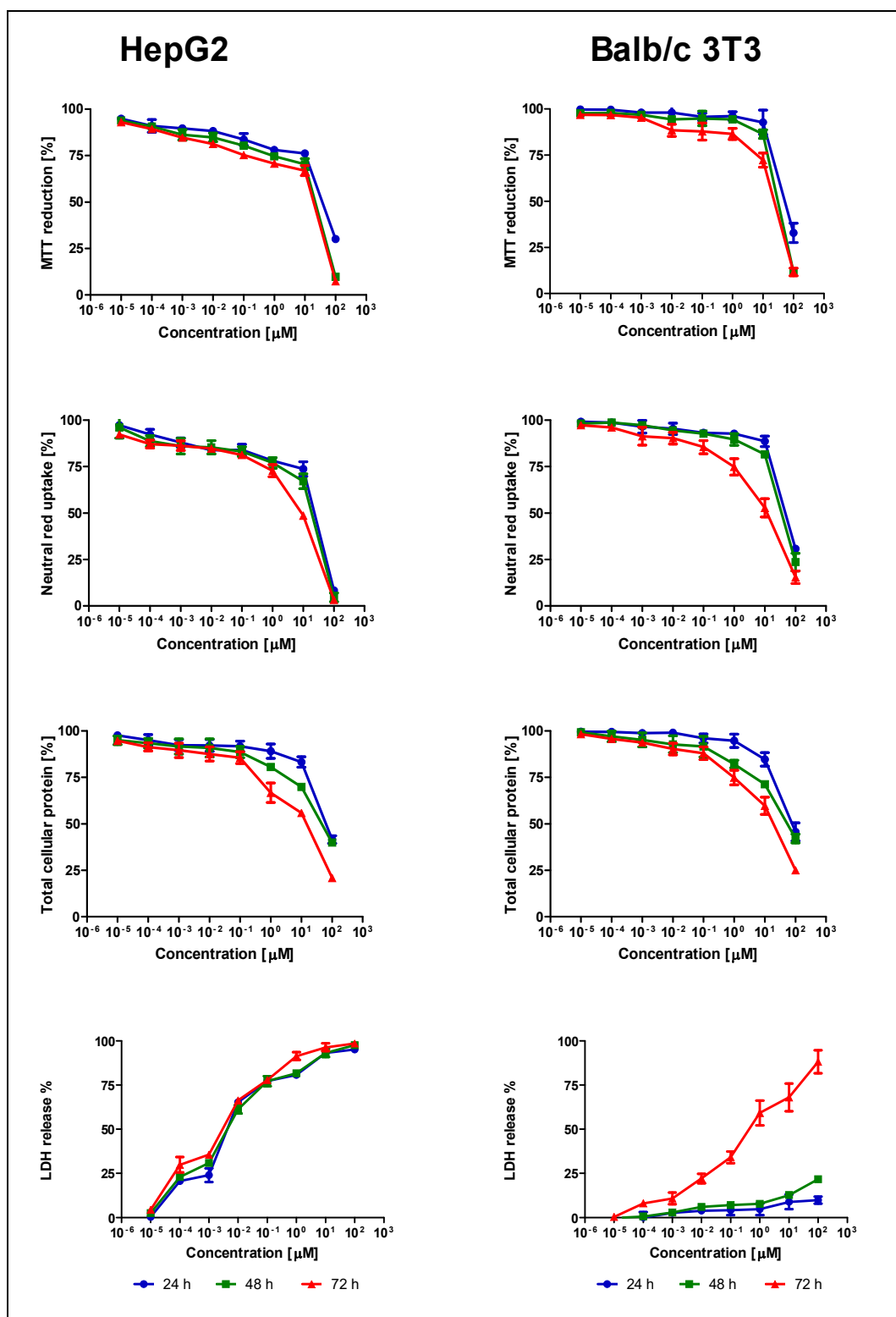
Значення найважливіших дескрипторів розрахованих для методів *Random Forest* та регресії Гаусівських процесів

Сп-ки	Дескриптори					Сп-ки	Дескриптори				
	GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m		GATS5e	BEHv1	НОМО	Mor18u	HATS5m
4339	0.79	3.903	-7.94842	-2.529	0.092	4603	0.633	4.058	-8.18931	-1.713	0.087
4341	0.8	4.028	-7.93693	-2.755	0.083	4604	0.663	4.059	-8.18176	-1.757	0.05
4342	0.84	4.028	-8.0143	-2.315	0.096	4605	0.652	4.059	-8.26288	-1.456	0.112
4353	0.916	4.029	-8.05942	-2.532	0.079	4606	0.839	4.011	-8.15222	-1.582	0.057
4354	0.879	4.029	-7.95185	-3.096	0.066	4614	0.642	4.059	-8.21397	-1.679	0.094
4366	0.874	3.909	-7.92691	-2.604	0.071	4615	0.715	4.059	-8.16527	-1.979	0.065
4376	0.718	4.027	-8.08236	-2.685	0.046	4620	0.674	4.059	-8.22578	-1.57	0.091
4377	0.761	4.027	-8.00612	-2.285	0.075						
4477	1.122	4.027	-8.24007	-2.811	0.041						
4478	1.082	3.895	-8.25184	-2.694	0.063						
4505	0.933	4.027	-8.38236	-2.646	0.062						
4575	0.637	4.058	-8.15746	-1.592	0.102						
4576	0.637	4.058	-8.16182	-1.712	0.091						
4577	0.653	4.057	-8.07526	-1.902	0.054						
4579	0.762	4.011	-8.16442	-1.524	0.053						
4580	0.683	4.011	-8.18988	-1.31	0.047						
4595	0.642	4.058	-8.24579	-1.526	0.107						
4598	0.642	4.058	-8.24667	-1.673	0.095						
4599	0.64	4.058	-8.16053	-1.892	0.058						
4600	0.684	4.058	-8.14297	-1.994	0.06						
4601	0.596	4.058	-8.17835	-1.68	0.058						
4602	0.657	4.058	-8.19923	-1.665	0.085						

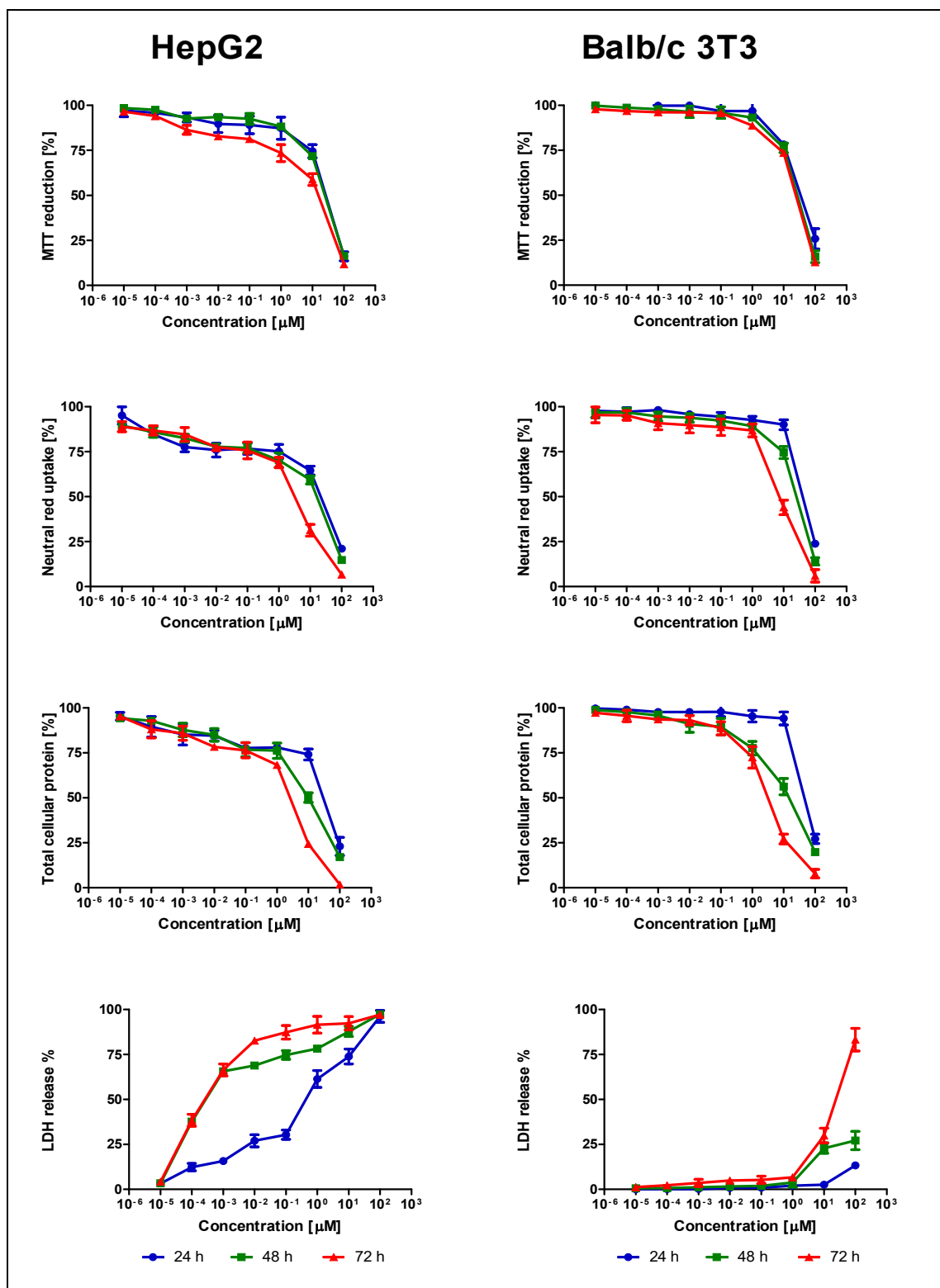
Криві залежності концентрації від часу експозиції (24, 48 та 72 год) сполуки 6.47 (суцільні лінії) та цисплатину (пунктирні лінії), для клітин гепатоцелюлярної карциноми НерG2 людини та нормальних клітин Balb/c 3T3, виміряні методами MTT, NRU, TCP та LDH тестів. Дані представлені як середнє значення $\pm$ СВ



Криві залежності концентрації від часу експозиції (24, 48 та 72 год) сполуки 5.27, для клітин гепатоцелюлярної карциноми НерG2 людини та нормальних клітин Balb/c 3T3, виміряні методами MTT, NRU, TSP та ЛДГ тестів. Дані представлені як середнє значення $\pm$ СВ

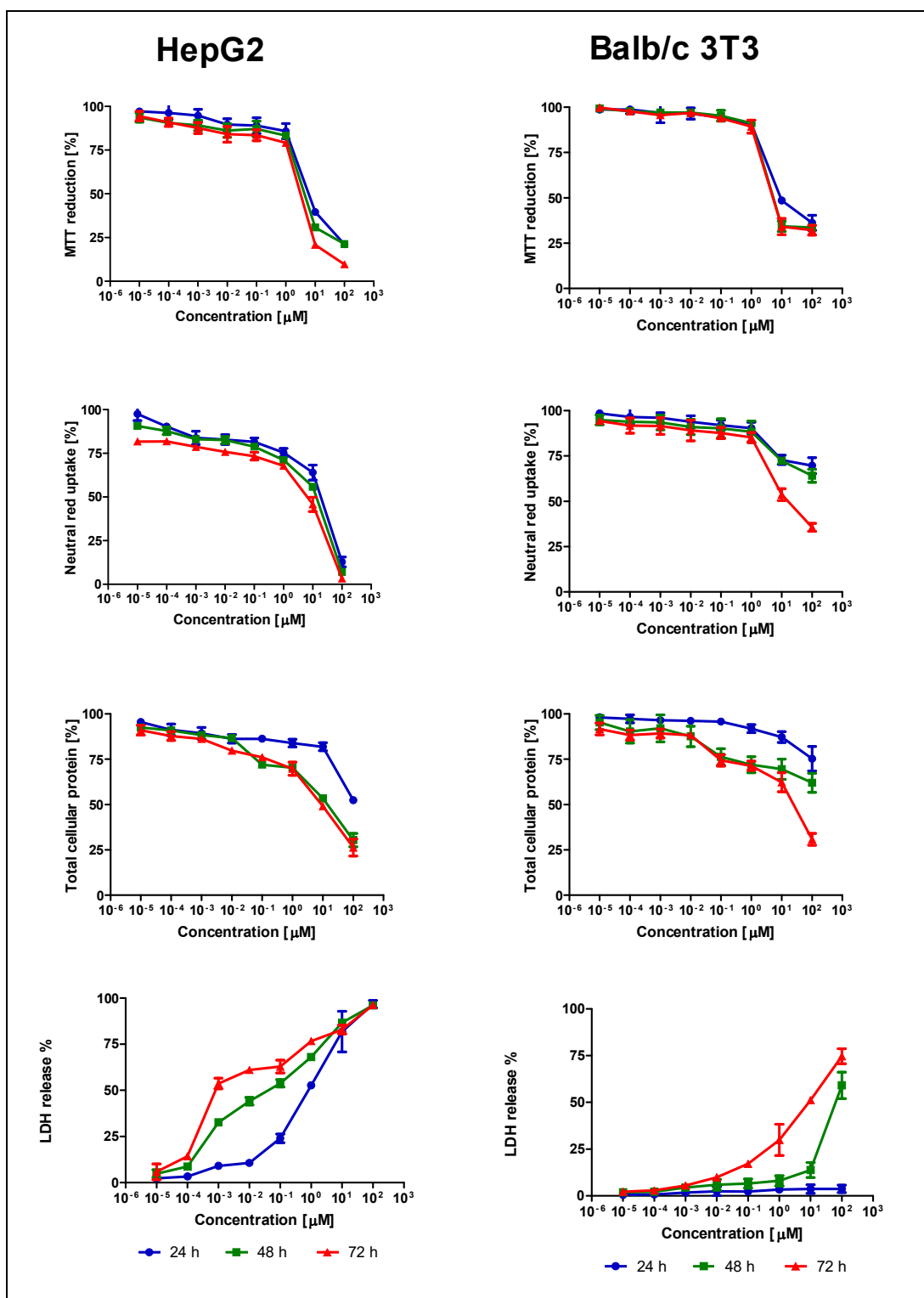


Криві залежності концентрації від часу експозиції (24, 48 та 72 год) сполуки 5.28, для клітин гепатоцелюлярної карциноми HepG2 людини та нормальних клітин Balb/c 3T3, виміряні методами MTT, NRU, TSP та ЛДГ тестів. Дані представлені як середнє значення $\pm$ СВ

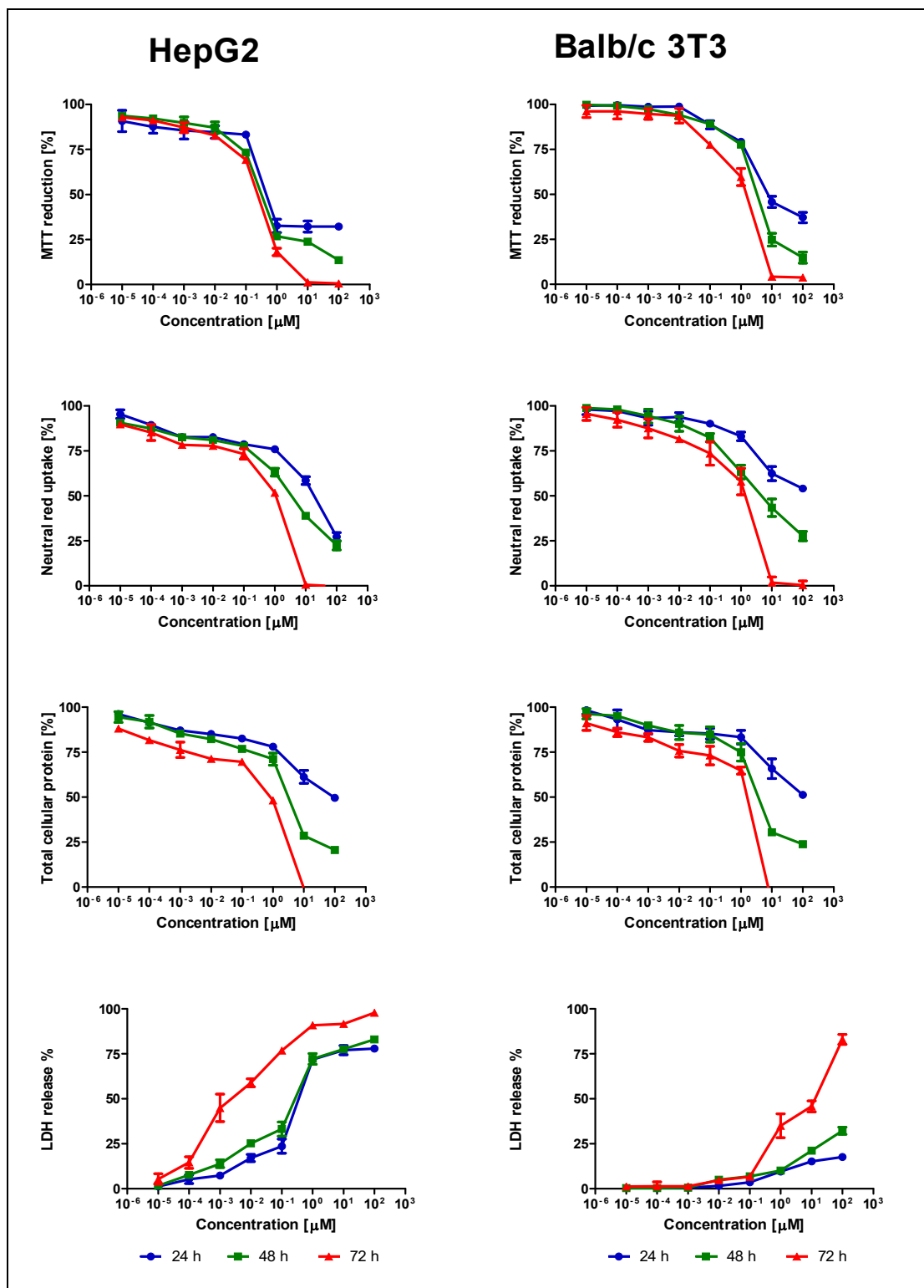


Додаток Е.6

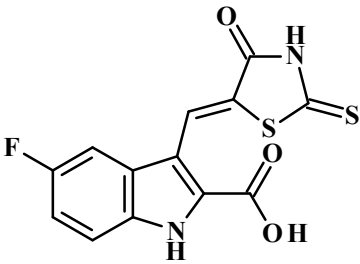
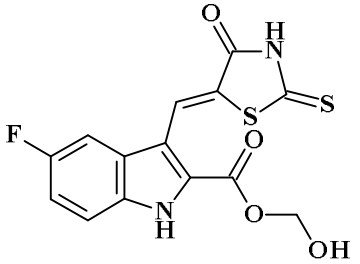
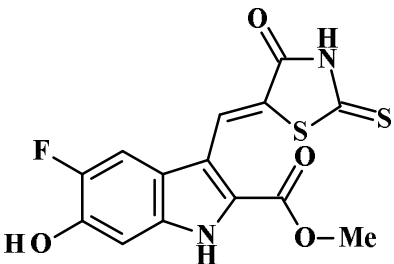
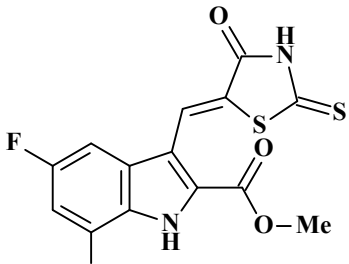
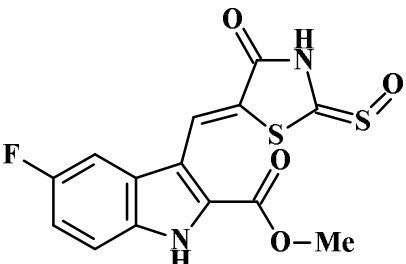
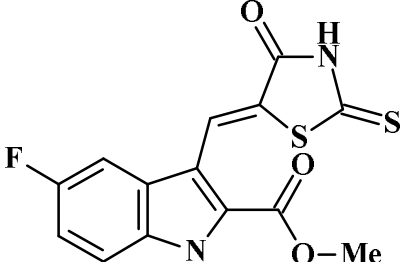
Криві залежності концентрації від часу експозиції (24, 48 та 72 год) сполуки 7.32, для клітин гепатоцелюлярної карциноми HepG2 людини та нормальних клітин Balb/c 3T3, виміряні методами MTT, NRU, TCP та ЛДГ тестів. Дані представлені як середнє значення $\pm$ СВ

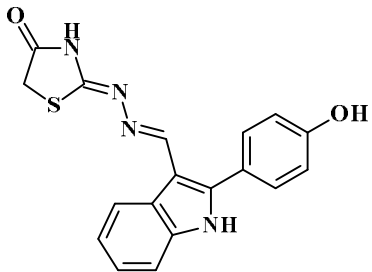
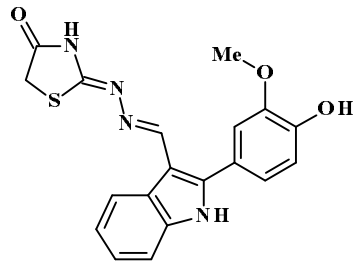
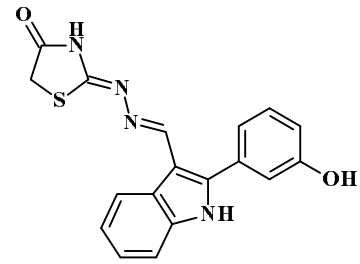
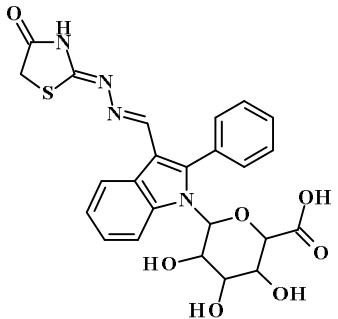
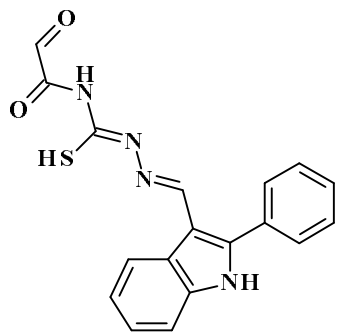


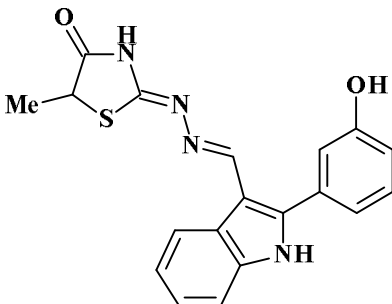
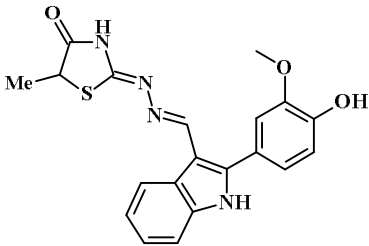
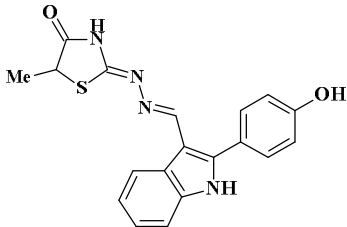
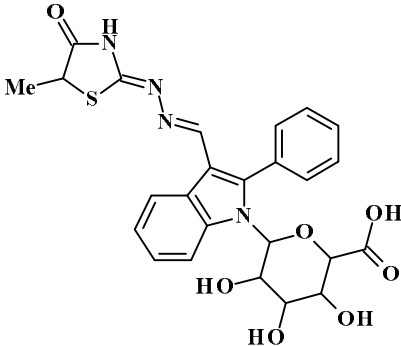
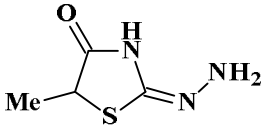
Криві залежності концентрації від часу експозиції (24, 48 та 72 год) сполуки 7.40, для клітин гепатоцелюлярної карциноми HepG2 людини та нормальних клітин Balb/c 3T3, виміряні методами MTT, NRU, TCP та ЛДГ тестів. Дані представлені як середнє значення $\pm$ СВ

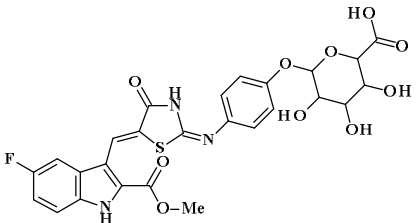
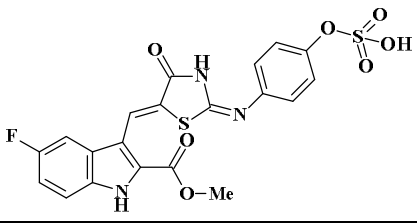
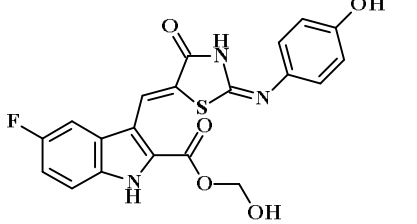
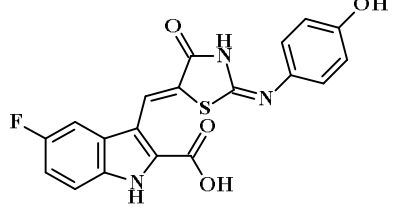
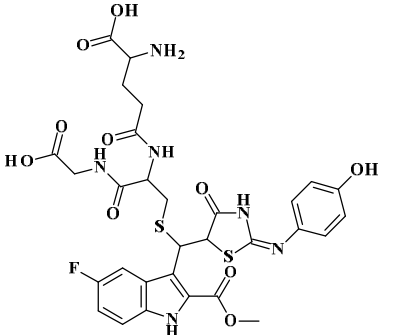


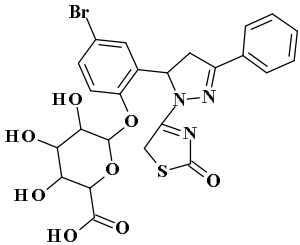
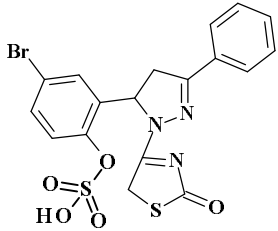
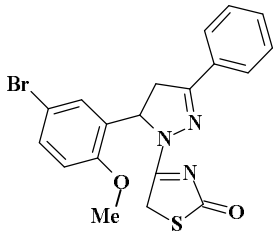
Прогнозовані метаболіти для сполук 5.27, 5.28, 6.47, 7.32 та 7.40

Сп-ка			Структури метаболітів		
	Ранжування	Скорингова функція			
6.47	Rank 1	0.44			
	Rank 3	0.36			
	Rank 6	0.34			

Сп-ка			Структури метаболітів		
	Ранжування	Скорингова функція			
5.27	Rank 1	0.43			
	Rank 4	0.39			
	Rank 4	0.32			

Сп-ка			Структури метаболітів		
	Ранжування	Скорингова функція			
5.28	Rank 1	0.40			
	Rank 4	0.36			
	Rank 5	0.29			

Сп-ка			Структури метаболітів		
	Ранжування	Скорингова функція			
7.32	Rank 1	0.98			
	Rank 2	0.91			
	Rank 3	0.48			
	Rank 5	0.31			

Сп-ка	Структури метаболітів				
	Ранжування	Скорингова функція			
7.40	Rank 1	0.95			
	Rank 2	0.85			
	Rank 3	0.69			
	Rank 4	0.30	