

УДК: 547.455:535.33/34:539.194

В. М. Андрианов, М. В. Королевич

Белорусский государственный аграрный технический университет

**РАСЧЕТ И СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ИК СПЕКТРОВ
24-ЭПИКАСТАСТЕРОНА И 28-ГОМОКАСТАСТЕРОНА (SS-КОНФИГУРАЦИЯ)
С РАЗЛИЧНОЙ СТРУКТУРОЙ ИХ БОКОВОЙ ЦЕПИ**

В рамках оригинального комбинированного подхода, сочетающего классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, проведен согласованный расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний практически важных биологически активных стероидных фитогормонов – молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона. Смоделирована их молекулярная структура и впервые дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических ИК полос поглощения в области 1500–900 cm^{-1} . Сопоставление теоретических и экспериментальных спектров показало, что теоретические спектры в целом удовлетворительно описывают основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения рассматриваемого спектрального диапазона. Сравнительный анализ экспериментальных ИК спектров и теоретических спектральных кривых поглощения этих близких по химическому строению молекул позволил оценить влияние структурных особенностей в пределах боковой цепи исследуемых молекул на формирование ИК спектров и найти связь между их структурными различиями и наблюдаемыми изменениями ИК спектров в области 1500–950 cm^{-1} . Показано, что наличие дополнительной группы $\text{C}28\text{H}_2$ в (22S,23S)-28-гомокастастероне непосредственно проявляется в виде основного вклада в РПЭ ряда нормальных колебаний (среди других нормальных колебаний), формирующих, в частности, такие интенсивные характеристические полосы поглощения ИК спектра, как полосы с максимумами 1383 и 1014 cm^{-1} , что сказывается на интенсивности этих полос поглощения ИК спектра.

Ключевые слова: ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, характеристические частоты, интерпретация ИК спектра, brassinosteroids.

Для цитирования: Андрианов В. М., Королевич М. В. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров 24-эпикастастерона и 28-гомокастастерона (ss-конфигурация) с различной структурой их боковой цепи // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2025. № 2 (296). С. 40–47.

DOI: 10.52065/2520-6141-2025-296-7.

V. M. Andrianov, M. V. Korolevich

Belarusian State Agrarian Technical University, Minsk, Belarus

**CALCULATION AND COMPARATIVE ANALYSIS
OF THE 24-EPICASTASTERONE AND 28-HOMOCASTASTERONE
(SS CONFIGURATION) IR SPECTRA WITH DIFFERENT STRUCTURES
OF THEIR SIDE CHAIN**

Within the framework of an original combined approach, combining classical analysis of normal oscillations by the molecular mechanics method with quantum-chemical assessment of absolute intensities, a consistent calculation of the frequencies and intensities of normal oscillations of practically important biologically active steroid phytohormones – molecules of (22S,23S)-24-epicastasterone and (22S,23S)-28-homocastasterone – was carried out. Their molecular structure was modeled and an interpretation of the most intense characteristic IR absorption bands in the 1500–900 cm^{-1} region was given for the first time. A comparison of theoretical and experimental spectra showed that the theoretical spectra, on the whole, satisfactorily describe the main, most intense characteristic absorption bands of the spectral range under consideration. A comparative analysis of the experimental IR spectra and theoretical spectral absorption curves of these molecules, which are similar in chemical structure, made it possible to evaluate the influence of structural features within the side chain of the studied molecules on the formation of IR spectra and to find a connection between their structural differences and the observed changes in the IR spectra in the region of 1500–950 cm^{-1} . It has been shown that the presence of an additional $\text{C}28\text{H}_2$ group in (22S,23S)-28-homocastasterone is directly manifested in the form of the main contribution to the RPE of a number of normal vibrations (among other normal vibrations), which form, in particular, such intense characteristic absorption bands of the IR spectrum as bands with maxima at 1383 and 1014 cm^{-1} , which affects the intensity of these absorption bands of the IR spectrum.

Keywords: IR spectroscopy, normal coordinate analysis, absolute IR intensities, characteristic frequencies, interpretation of the IR spectrum, brassinosteroids.

For citation: Andrianov V. M., Korolevich M. V. Calculation and comparative analysis of the 24-epicastasterone and 28-homocastasterone (ss configuration) IR spectra with different structures of their side chain. *Proceedings of BSTU, issue Physics and Mathematics. Informatics*, 2025, no. 2 (296), pp. 40–47 (In Russian) DOI: 10.52065/2520-6141-2025-296-7.

Введение. Брассинолиды и кастастероны являются биологически активными гормонами, представляющими класс фитогормональных стероидов (ФС). Они способствуют повышению качества растительной продукции, токсичны к быстро разрастающимся клеткам опухоли и рассматриваются как потенциально антиканцерогенные фармакологические средства [1–4]. На сегодня эта группа стероидов насчитывает свыше 70 соединений [5–7].

Известно [8], что биологическая активность этих соединений существенно зависит от стереохимической конфигурации атомов C22 и C23, структуры и конфигурации алкильного заместителя у C24 боковой цепи, что может оказывать влияние на токсичность производных брассинолидов и кастастеронов для целого ряда раковых клеток [9, 10].

Высокая биологическая активность связана с 22R, 23R-диольной структурой в стероидной боковой цепи. Синтетические аналоги с 22S, 23S-гидроксильными группами менее активны [11]. В то же время в природной 22R, 23R-конфигурации брассиностероидов соединения с 24S-метил- или этилгруппой показывают большую биоактивность, чем соответствующие гормоны с 24R-алкил группой [12], отражая значимость стереохимии также и у этого асимметрического центра.

Для брассинолида характерно наличие в стероидном скелете семичленного цикла, в который входят карбонильная группа C=O и эфирная C–O–C связь, в то время как для кастастерона – шестичленного цикла с карбонильной группой.

ИК-спектроскопия предоставляет большие возможности для получения информации о структуре молекул. Тем не менее известно лишь несколько экспериментальных работ [13–15], в которых проведен анализ зарегистрированных ИК спектров ряда стероидных фитогормонов. Для установления структурных корреляций в практически важных биологически активных стероидных фитогормонах необходимы теоретические исследования: моделирование молекулярной структуры, расчет колебательных спектров, сопоставительный анализ экспериментальных и рассчитанных ИК спектров близких по структуре молекул данного класса соединений.

Ранее нами были проведены полный расчет колебательных спектров и моделирование спектральных кривых оптической плотности биологически активных молекул класса ФС – гомобрассинолида и (22S,23S)-гомобрассинолида [16], (22S,23S)-24-эпибрассинолида [17], (22R,23R)-28-гомокастастерона [18].

Цель данной работы заключалась в получении структурных параметров, проведении полного расчета колебательных спектров и моделировании спектральных кривых оптической плотности близких по строению представителей стероидных гормонов, обладающих биологической активностью – молекул (22S,23S)-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона для детальной интерпретации и сопоставительного анализа их экспериментальных ИК спектров.

Основная часть. Для решения поставленной задачи применен оригинальный комбинированный подход к анализу ИК спектров сложных органических соединений, разработанный и реализованный в виде комплекса программ при исследовании спектров углеводов [19]. Он сочетает классический анализ частот нормальных колебаний многоатомных молекул с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, соответствующих интегральным интенсивностям ИК полос поглощения.

Расчет частот, форм, распределения потенциальной энергии (РПЭ) нормальных колебаний, смещений атомов в декартовых координатах в каждом нормальном колебании для расчета абсолютных интенсивностей ИК полос поглощения проведен в рамках метода молекулярной механики (ММ).

Теоретическая спектральная кривая оптической плотности в расчете на один моль вещества и единицу оптического пути моделировалась как сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и заданным полуширинам, которые оценивались на основании экспериментального спектра [19]. Полуширины полос поглощения полагались равными 15 см^{-1} , некоторые из них принимали значения от 8 до 20 см^{-1} .

Интерпретация наблюдаемого ИК спектра выполнена на основе сопоставления экспериментальных значений частот $\nu_{\text{эксп}}$ и интегральных интенсивностей полос поглощения с рассчитанными частотами $\nu_{\text{расч}}$ и абсолютными интенсивностями нормальных колебаний. Анализируемый ИК спектр регистрировался ИК-фурьеспектрометром NEXUS. Синтезированное вещество растиралось с обезвоженным мелкодисперсным KBr, приготовленный порошок прессовался в вакууме по стандартной методике.

Для получения структурных параметров и декартовых координат атомов исследуемых молекул использован современный пакет программ для молекулярного моделирования HyperChem 7.5, оптимизация геометрии проведена квантово-химическим

методом PM3. В качестве исходных параметров использованы данные рентгеноструктурного анализа (РСА) о кристаллической и молекулярной структуре молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона [20]. Исходя из этих данных нами построены молекулярные структуры, представленные на рис. 1, и определены декартовы координаты атомов молекул (22S,23S)-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона для проведения расчета их колебательных спектров.

Молекулы (22S,23S)-эпикастастерона (I) и (22S,23S)-28-гомокастастерона (II) образуют три шестичленных (A, B, C) и один пятичленный (D) циклы, а также объемную боковую цепь (рис. 1). Структурные различия исследуемых молекул локализованы в пределах боковой цепи: природа заместителя в положении 24 (метильный (I), этильный (II)) и его конфигурация (24R (I), 24S (II)) (рис. 1).

Замена метильной группы на этильную в положении 24 при переходе от эпи- к гомокастастерону приводит к конформационным изменениям боковой цепи. В синтетических молекулах с SS-конфигурацией такой переход приводит к конформационным различиям групп атомов относительно связей C23-C24 и C24-C25 боковой цепи, находящихся в непосредственной близости к месту замещения.

Колебательная задача (расчет частот, форм, смещений атомов в декартовых координатах) решалась в приближении метода молекулярной механики (ММ). Расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний исследуемых молекул проведен в рамках оригинального комбини-

рованного подхода, позволяющего сочетать классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой интенсивностей методом CNDO/2. По этим данным смоделированы спектральные кривые оптической плотности исследуемых молекул. Теоретические спектры удовлетворительно описывают основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения экспериментальных спектров (22S,23S)-эпикастастерона, что демонстрирует рис. 2, и (22S,23S)-28-гомокастастерона в спектральном диапазоне 1500–900 см^{-1} . Сопоставление теоретических и экспериментальных спектров показывает, что теоретические спектры в целом удовлетворительно описывают основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения рассматриваемого спектрального диапазона. Так, для молекулы (22S,23S)-эпикастастерона, как следует из рис. 2, четырем наиболее интенсивным полосам поглощения 1465, 1445, 1438 и 1383 см^{-1} экспериментального спектра в интервале 1500–1200 см^{-1} можно поставить в соответствие полосы с частотами их максимумов 1459, 1429, 1394 см^{-1} теоретического спектра соответственно. В то же время три наиболее интенсивные полосы поглощения 1082, 1045 и 1014 см^{-1} экспериментального спектра в интервале 1200–950 см^{-1} можно соотнести с полосами теоретического спектра с частотами их максимумов 1104, 1048, 1009 см^{-1} . При этом максимальный частотный сдвиг соответствующих полос $\nu_{\text{расч}}$ и $\nu_{\text{эксп}}$ для этой молекулы составляет от 11 см^{-1} (диапазон 1500–1200 см^{-1}) до 22 см^{-1} (1200–950 см^{-1}).

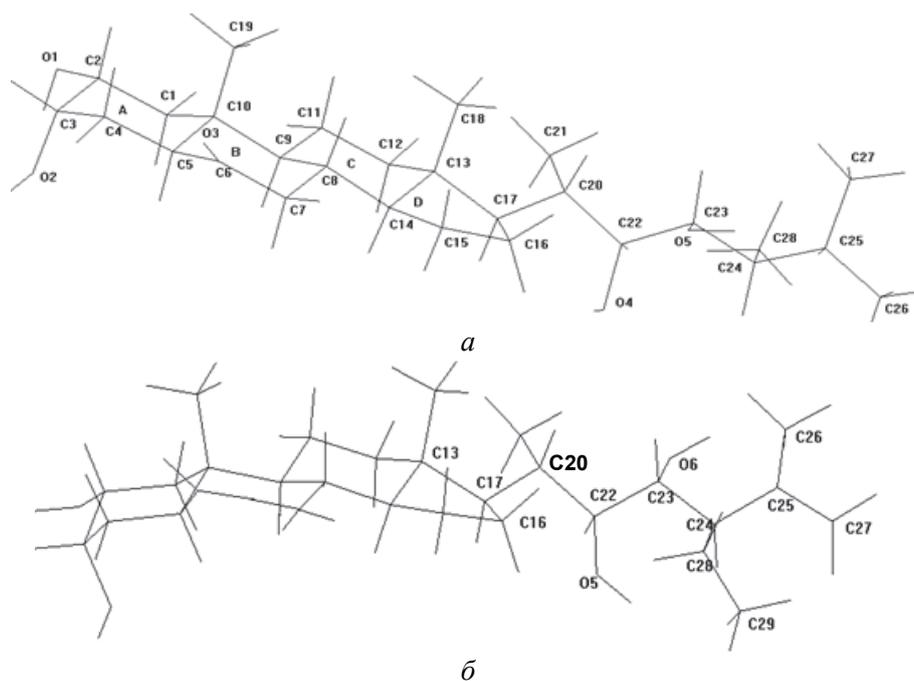


Рис. 1. Молекулярные структуры (22S,23S)-24-эпикастастерона (а) и (22S,23S)-28-гомокастастерона (б), построенные по данным РСА

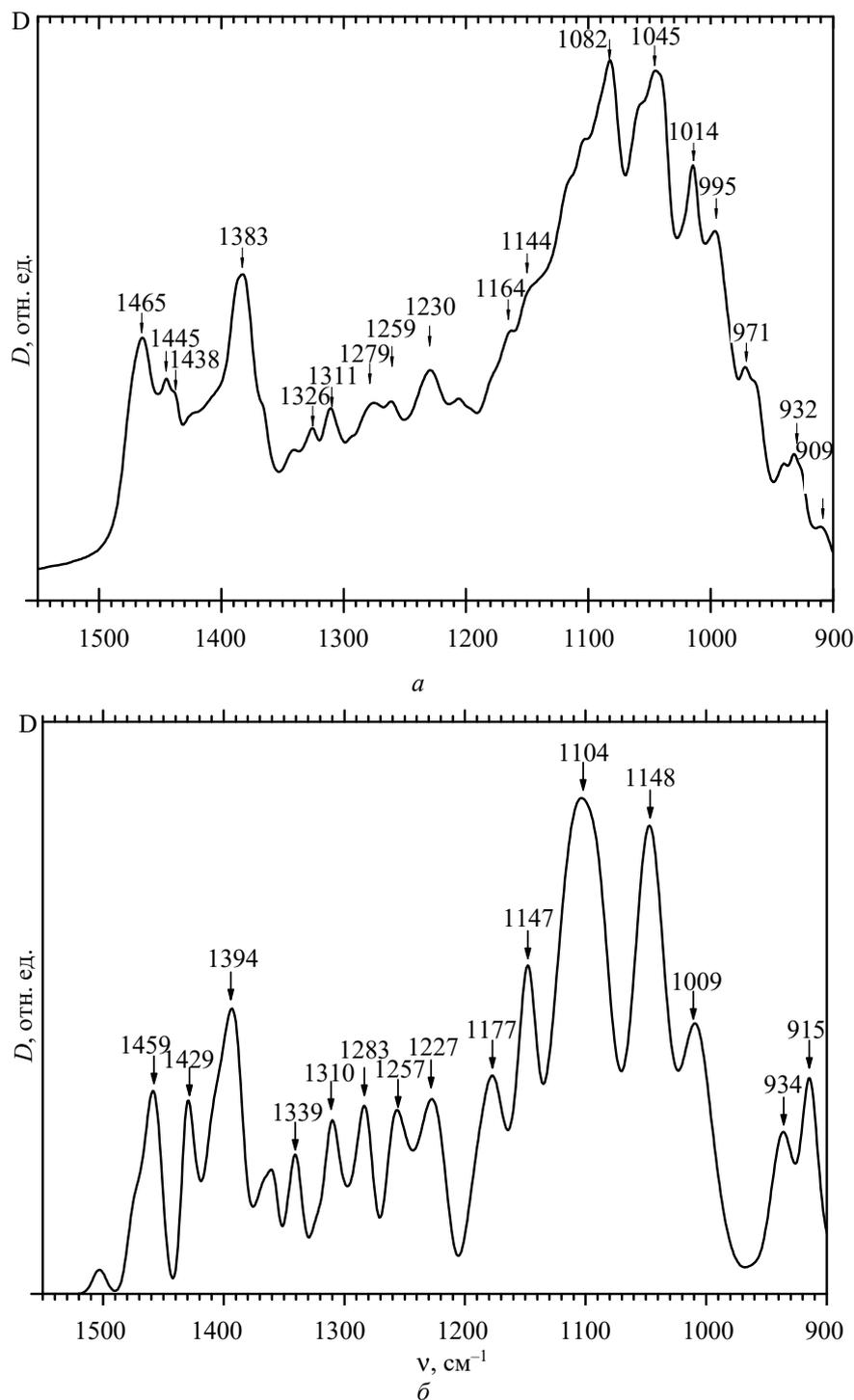


Рис. 2. Экспериментальный (а) и теоретический (б) ИК спектры поглощения (D , отн. ед.) (22S, 23S)-24-эпикастастерона в диапазоне частот 1550–900 cm^{-1}

Отнесение экспериментальных полос и интерпретация наблюдаемого ИК спектра этой молекулы выполнены на основе сопоставления наблюдаемых частот $\nu_{\text{эксп}}$ с частотами нормальных колебаний $\nu_{\text{рас}}$ и интегральных интенсивностей наблюдаемых полос поглощения с рассчитанными абсолютными интенсивностями. В таблице дана интерпретация наиболее интен-

сивных характеристических полос поглощения ИК спектра исследуемых молекул в области 1500–900 cm^{-1} .

Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона (наиболее интенсивных характеристических полос поглощения ИК спектров этих

молекул в области 1500–900 см⁻¹) показал, что небольшие различия их молекулярной структуры приводят к изменениям формы колебания в ряде нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения. Поскольку каждая полоса экспериментального спектра имеет сложное происхождение и состоит из

ряда полос разной интенсивности (в теоретическом спектре – сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и заданным полуширинам – от 8 до 25 см⁻¹), то перераспределение интенсивностей составляющих полос при переходе к другому соединению приводит к изменению интенсивности суммарной полосы поглощения.

Экспериментальные характеристические ($\nu_{\text{экс}}$) и рассчитанные ($\nu_{\text{рас}}$) частоты (см⁻¹) ИК полос поглощения, абсолютные интенсивности A (10¹⁶·см²·моль⁻¹·с⁻¹) и РПЭ нормальных колебаний молекулы (22S,23S)-эпикастастерона (I) и (22S,23S)-гомокастастерона (II) в спектральной области 1500–900 см⁻¹

$\nu_{\text{экс}}$	$\nu_{\text{рас}}$ (I)	$\nu_{\text{рас}}$ (II)	A (I)	A (II)	РПЭ(%) (I)	РПЭ(%) (II)
1465 (1459)	1497	1498	170	1	23 HC19H, 19 HC18H, 17 CC19H, 15 CC18H, 9 HC4H	26 HC19H, 19 CC19H, 18 HC18H, 14 CC18H, 7 HC4H, 7 HC11H
	1495	1496	81	9	20 HC18H, 17 HC19H, 20 CC18H, 13CC19H, 11HC4H	26 HC18H, 21 CC18H, 18 HC19H, 14 CC19H, 8 HC4H, 6HC11H
	1486	1485	31	92	55 HC4H, 20 HC19H	60 HC4H, 17 HC19H, 11 CC4H, 6 C10C19H
	1475	1476	37	2	56 HC12H, 12 HC1H, 10 CC12H, 8 HC11H	54 HC12H, 12 HC1H, 10 CC12H, 9 HC11H
	1473	1473	16	15	67 HC1H	65 HC1H, 8 HC12H, 6 CC1H2, 5 HC11H
1445 (1429)	1459	1459	27	2	72 HC19H	70 HC19H, 7 HC7H, 5 CC19H
	1456	1458	52	10	47 HC7H, 20 HC18H, 11 HC19H	41 HC26H, 33 CC26H, 8 HC29H
	1449	1453	47	14	41 C23O5H	42 HC18H, 25 HC7H, 8 HC15H, 6 HC21H
	1446	1450	57	70	44 HC26H, 34CC26H	42 HC27H, 33 CC27H, 8 HC28H, 5 HC29H
		1447		24		48 HC21H, 27 CC21H, 14 HC18H
1438 (1429)	1431	1432	40	6	74 HC16H	75 HC16H, 15 CC16H
	1429	1429	244	66	86 HC18H	88 HC18H
	1426	1426	285	15	90 HC19H	91 HC19H
1383 (1394)	1393	1392	74	51	27 CC1H, 18 C2O1H	18CC1H, 6 C2O1H, 6 C20C17H, 6 C24C25H, 5 HC21H2
	1390	1392	77	57	31 C20C17H, 22 C13C17H	17 CC1H, 9 C24C25H, 6 C2O1H, 5 C28C24H
	1384	1389	96	72	27 CC8H, 26 CC9H	27 C20C17H, 19 C13C17H, 5 C17C20
	1376	1384	120	69	36 CC5H, 28CC4H	29 CC8H, 23 CC9H
	1364	1376	239	1	28 CC22H, 14 CC25H	35 CC5H, 26 CC4H, 6 C4C5
	1363	1376	85	16	28 CC8H, 28 CC9H	44 C29C28H, 8 HC29H, 5 HC28H
		1363		96		27 CC8H, 23 CC9H
		1362		19		25 CC22H, 6 CC25H, 5 C23O5H, 5 C10C9H
1326 (1339)	1333	1333	115	60	16 CC20H, 11 CC14H, 14 CC16H, 11CC7H	17 CC20H, 13 CC16H
	1328	1331	11	19	22 CC20H, 13 CC23H	13 C2C3H, 12 C3C2H, 11 C3O2, 9 O2C3H, 8 C3O2H, 5 C3C4H
	1326	1324	17	314	22 CC2H, 10 CC5H, 8CC9H	10 C17C20H, 6 C8C9H
1311 (1310)	1314	1317	77	74	14 CC14H, 11 CC9H, 8 CC16H	14 CC16H, 9 C13C14H, 5 C16C17H
	1306	1312	76	2	20 CC24H, 17CC20H, 12CC22H	26 CC24H, 11 CC20H, 5 C27C25H
		1306		71		29 CC5H, 14 C8C9H
1082 (1104)	1109	1108	78	17	16 C7C8, 13CC7H, 11C8C9	14 CC7H, 12 C7C8, 11 C8C9, 5 C11C12H
	1101	1102	35	3	11 CC16H, 6 C17C20, 5 C8C14, 5 C20C21	6 C15C16H, 5 C17C20
		1098		7		39 C3C4H, 5 C1C2, 5 C10C19, 6 C2C1H
	1098	1094	39	6	39 CC4H, 7 C1C2, 5 C10C19	14 C14C15H, 8 C11C12, 8 C16C17, 5 C15C16
	1094		39		12 C11C12, 10 CC15H, 8 C16C17, 8 C7C8	
1045 (1048)	1077	1078	77	12	16 CC16H, 12CC15H, 8C20C21, 6 C14C15, 6 C15C16	19 CC16H, 18 C20C21, 8 C15C16, 7 CC15H, 6 C14C15, 5 C7C8
	1069	1071	48	16	47 CC15H, 7 C20C21, 5 C14C15	31 CC15H, 9 C20C21, 9 C22O, 7 O5C23H, 6 C23O
	1060	1066	129	36	27 CC15H, 14 CC21H, 8 C20C21	21 CC15H, 11 C25C27H, 11 C25C26H, 6 C29C28H, 5 C28C29
		1063		18	17 C11C12, 9CC21H, 9 CC18H, 7 C16C17, 5 C14C15	14 C25C27H, 13 C28C29, 12 C25C26H, 11 CC15H, 5 O5C23H
		1058		11		20 CC15H, 14 C11C12, , 7 C14C15
1014 (1009)	1028	1028	10	33	29 CC28H, 19 CC27H, 18 C24C28	29 C28C29, 29 C28C29H, 11 C25C27H, 6 C24CC29, 6 C25C26H
	1027		72		9 C7C8, 7 CC7H, 7 C10C19H, 7 CC11H, 6 C8C9	10 C10C19H, 8 C7C8, 7 C6C7H, 7 C12C11H, 6 C8C9
	1011	1026	39	2	23 CC21H, 20 CC28H, 8 C15C16	
		1015		25		51 C28C29H, 14 C24C28H, 12 C20C21H
		1009		77		28 C15C16, 18 C16C17, 11 CC15H

Примечание. В скобках указаны частоты $\nu_{\text{рас}}$ максимумов полос поглощения теоретического спектра молекулы (I).

Так, например, из представленных в таблице результатов следует, что интенсивная полоса с максимумом 1465 см^{-1} в экспериментальном спектре состоит из пяти составляющих полос, основной вклад в которые вносят деформационные колебания метильных (НС18Н, НС19Н, СС18Н, СС19Н) и метиленовых (НС4Н, НС12Н, НС1Н) групп, входящих в состав шестичленных циклов А и С остова молекулы. Вторая интенсивная полоса этого спектрального диапазона с максимумом 1383 см^{-1} в экспериментальном спектре, согласно расчету, состоит из шести (I) и восьми (II) составляющих полос, обусловленных, главным образом, деформационными колебаниями ССН метинных групп, а также деформационными колебаниями СОН гидроксилы О1Н и О5Н. Что же касается интенсивных характеристических полос с максимумами 1082 , 1045 и 1014 см^{-1} в экспериментальном спектре, то, по данным расчета (полосы в теоретическом спектре, представленном на рис. 2, с максимумами 1104 , 1048 и 1009 см^{-1}), основной вклад в формирование этих полос вносят деформационные колебания ССН метиленовых и метильных групп, а также валентные колебания связей С–С как остова, так и боковой цепи исследуемых молекул.

Важно отметить, что наличие дополнительной группы С28Н₂ в (22S,23S)-28-гомокастастероне непосредственно проявляется в виде основного вклада в РПЭ ряда нормальных колебаний (среди других нормальных колебаний), формирующих, в частности, такие интенсивные характеристические полосы поглощения ИК спектра, как полосы с максимумами 1383 и 1014 см^{-1} .

Закключение. В результате проведенных теоретических исследований смоделирована молекулярная структура молекул (22S,23S)-24-эпикастастерона и (22S,23S)-28-гомокастастерона. Выполнены полный расчет колебательного спектра и моделирование спектральной кривой оптической плотности исследуемых молекул. На основе сопоставления их экспериментальных ИК спектров и рассчитанных спектральных кривых поглощения впервые дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических ИК полос поглощения в области $1500\text{--}900\text{ см}^{-1}$. Показано, что наличие дополнительной группы С28Н₂ в (22S,23S)-28-гомокастастероне сказывается на интенсивности полос поглощения ИК спектра с максимумами 1383 и 1014 см^{-1} .

Список литературы

1. OSW-1: a Natural Compound With Potent Anticancer Activity and a Novel Mechanism of Action / Y. Zhou [et al.] // *J. Natl. Cancer Inst.* 2005. Vol. 97. P. 1781–1785.
2. Structure determination of inonotsuoxides A and B and in vivo anti-tumor promoting activity of inotodiol from the sclerotia of *Inonotus obliquus* / T. Nakata [et al.] // *Bioorg. Med. Chem.* 2007. Vol. 15. P. 257–264.
3. Biological effects of oxidized phytosterols: a review of the current knowledge / E. Hovenkamp [et al.] // *Prog. Lipid Res.* 2008. Vol. 47. P. 37–49.
4. Cardiac glycosides in cancer research and cancer therapy / T.-M. Wang [et al.] // *J. Nat. Prod.* 2007. Vol. 70. P. 1429–1433.
5. Khripach V. A., Zhabinskii V. N., de Groot A. E. Brassinosteroids: a new class of plant hormones. San Diego, CA: Academic press, 1999. 456 p.
6. Nemhauser J. L., Chory J. Bring it on: new insights into the mechanism of brassinosteroid action // *J. Exp. Bot.* 2004. Vol. 55. P. 265–270.
7. Hu Y., Bao F., Li J. Promotive effect of brassinosteroids on cell division involves a distinct CycD3-induction pathway in *Arabidopsis* // *Plant J.* 2000. Vol. 24. P. 693–701.
8. Drosihn S., Porzel A., Brandt W. Determination of preferred conformations of brassinosteroids by means of NMR investigations and Boltzmann statistical analysis of simulated annealing calculations // *J. Mol. Model.* 2001. Vol. 7. P. 34–42.
9. Anticancer and antiproliferative activity of natural brassinosteroids / J. Malikova [et al.] // *Phytochemistry.* 2008. Vol. 69. P. 418–426.
10. Toxicity of (22R,23R)-22,23-dihydroxystigmastane derivatives to cultured cancer cells / A.Yu. Misharin [et al.] // *Steroids.* 2010. Vol. 75. P. 287–294.
11. Synthesis of Brassinosteroids of Varying Acyl Side Chains and Evaluation of Their Brassinolide-like Activity / S. Uesusuki [et al.] // *Biosci Biotechnol Biochem.* 2004. Vol. 68. P. 1097–1105.
12. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids // *Molecular Structure and Biological Activity of Steroids.* CRC Press, Boca Raton, FL, 1992. P. 317–340.
13. Проявление в инфракрасных спектрах строения и межмолекулярных взаимодействий биологически активных брассиностероидов / Н. А. Борисевич [и др.] // *Журнал прикладной спектроскопии.* 2007. Т. 74, № 4. С. 610–616.

14. ИК спектры brassinosterоидов стигмастанового ряда, различающихся конфигурацией и числом диольных группировок / Н. А. Борисевич [и др.] // Журнал прикладной спектроскопии. 2009. Т. 76, № 6. С. 652–658.

15. Борисевич Н. А., Буслов Д. К. Инфракрасные спектры стероидных фитогормонов brassinолида, кастастерона и их 24-эпипроизводных // Журнал прикладной спектроскопии. 2010. Т. 77, № 4. С. 529–534.

16. Андрианов В. М., Королевич М. В. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрассинолида и (22S,23S)-гомобрассинолида // Журнал прикладной спектроскопии. 2015. Т. 82, № 4. С. 485–496.

17. Андрианов В. М., Королевич М. В., Вельченко А. А. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрассинолида и (22S,23S)-24-эпибрассинолида // Журнал прикладной спектроскопии. 2019. Т. 86. № 6. С. 847–858.

18. Андрианов В. М., Королевич М. В., Шевченко А. А. Полный расчет колебательного спектра молекулы 28-гомокастастерона (RR-конфигурация) в возможных конформациях // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1. С. 32–38.

19. Королевич М. В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Минск, 2009. 333 с.

20. Kutschabsky L., Reck G. Private Communication to the Cambridge Structural Database, deposition number CCDC 201799. 2003.

References

1. Zhou Y., Garcia-Prieto C., Carney D. A., Xu R., Pelicano H., Kang Y. OSW-1: a Natural Compound With Potent Anticancer Activity and a Novel Mechanism of Action. *J. Natl. Cancer Inst.*, 2005, vol. 97, pp. 1781–1785.

2. Nakata T., Yamada T., Taji S., Ohishi H., Wada S., Tokuda H. Structure determination of inotsuoxides A and B and in vivo anti-tumor promoting activity of inotodiol from the sclerotia of *Inonotus obliquus*. *Bioorg. Med. Chem.*, 2007, vol. 15, pp. 257–264.

3. Hovenkamp E., Demonty I., Plat J., Lutjohann D., Mensink R.P., Trautwein E.A. Biological effects of oxidized phytosterols: a review of the current knowledge. *Prog. Lipid Res.*, 2008, vol. 47, pp. 37–49.

4. Wang T-M., Hojo T., Ran F-X., Wang R-F., Wang R-Q., Chen H-B. [et al.]. Cardiac glycosides in cancer research and cancer therapy. *J. Nat. Prod.*, 2007, vol. 70, pp. 1429–1433.

5. Khripach V. A., Zhabinskii V. N., de Groot A. E. Brassinosteroids: a new class of plant hormones, San Diego, CA, Academic press Publ., 1999. 456 p.

6. Nemhauser J. L., Chory J. Bring it on: new insights into the mechanism of brassinosteroid action. *J. Exp. Bot.*, 2004, vol. 55, pp. 265–270.

7. Hu Y., Bao F., Li J. Promotive effect of brassinosteroids on cell division involves a distinct CycD3-induction pathway in *Arabidopsis*. *Plant J.*, 2000, vol. 24, pp. 693–701.

8. Drosihn S., Porzel A., Brandt W. Determination of preferred conformations of brassinosteroids by means of NMR investigations and Boltzmann statistical analysis of simulated annealing calculations. *J. Mol. Model.*, 2001, vol. 7, pp. 34–42.

9. Malikova J., Swaczynova J., Kolar Z., Strnad M. Anticancer and antiproliferative activity of natural brassinosteroids. *Phytochemistry*, 2008, vol. 69, pp. 418–426.

10. Misharin A. Yu., Mehtiev A. R., Zhabinskii V. N., Khripach V. A., Timofeev V. P., Tkachev Ya. V. Toxicity of (22R,23R)-22,23-dihydroxystigmastane derivatives to cultured cancer cells. *Steroids*, 2010, vol. 75, pp. 287–294.

11. Uesusuki S., Watanabe B., Yamamoto S., Otsuki J., Nakagawa Y., Miyagawa H. Synthesis of Brassinosteroids of Varying Acyl Side Chains and Evaluation of Their Brassinolide-like Activity. *Biosci Biotechnol Biochem.*, 2004, vol. 68, pp. 1097–1105.

12. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids. *Molecular Structure and Biological Activity of Steroids*. CRC Press, Boca Raton, FL, 1992, pp. 317–340.

13. Borisevich N. A., Skorniyakov I. V., Khripach V. A., Tolstorozhev G. B., Zhabinsky V. N. Manifestation in infrared spectra of the structure and intermolecular interactions of biologically active brassinosteroids. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 2007, vol. 74, no. 4, pp. 610–616 (In Russian).

14. Borisevich N. A., Buslov D. K., Zhabinsky V. N., Khripach V. A. IR spectra of brassinosteroids of the stigmastane series, differing in configuration and number of diol groups. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 2009, vol. 76, no. 6, pp. 652–658 (In Russian).

15. Borisevich N. A., Buslov D. K. Infrared spectra of brassinolide and castasterone steroidal phytohormones and their 24-epi-derivatives. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 2010, vol. 77, no 4, pp. 491–495 (In Russian).

16. Andrianov V. M., Korolevich M. V. Calculation and comparative analysis of IR spectra of homobrassinolide and (22S,23S)-homobrassinolide. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 2015, vol. 82, no. 4, pp. 485–496 (In Russian).

17. Andrianov V. M., Korolevich M. V., Velcheanko A. A. Calculation and comparative analysis of IR spectra of homobrassinolide and (22S, 23S)-24-epibrassinolide. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii*, 2019, vol. 86, no. 6, pp. 847–858 (In Russian).

18. Andrianov V. M., Korolevich M. V., Shevchenok A. A. Complete calculation of the vibrational spectrum of the 28-homocastasterone molecule (RR-configuration) in possible conformations. *Trudy BGTU* [Proceeding of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2024, no. 1, pp. 32–38 (In Russian).

19. Korolevich M. V. *Analiticheskaya infrakrasnaya spektroskopiya sakharidov. Dis. ... d-ra fiz.-mat nauk* [Analytical infrared spectroscopy of saccharides. Diss. ... DSc (Physics and Mathematics)]. Minsk, 2009. 333 p.

20. Kutschabsky L., Reck G. Private Communication to the Cambridge Structural Database, deposition number CCDC 201799. 2003.

Информация об авторах

Андрианов Виктор Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры электроснабжения и электротехники. Белорусский государственный аграрный технический университет (пр-т Независимости, 99/1, 220023, Минск, Республика Беларусь). E-mail: v.andrianov71@gmail.com

Королевич Майя Васильевна – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры естественнонаучных дисциплин. Белорусский государственный аграрный технический университет (пр-т Независимости, 99/1, 220023, Минск, Республика Беларусь). E-mail: korolevi@dragon.bas-net.by

Information about the authors

Andrianov Viktor Mikhailovich – DSc (Physics and Mathematics), Professor, the Department of Power Supply and Electrical Engineering. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1 Nezavisimosti Ave, 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.andrianov71@gmail.com.

Korolevich Maya Vasilievna – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Natural Sciences. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1 Nezavisimosti Ave, 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: korolevi@dragon.bas-net.by.

Поступила 04.04. 2025