

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**TOPICAL ISSUES OF NEW MEDICINES DEVELOPMENT**

МАТЕРІАЛИ  
XXVIII МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ  
КОНФЕРЕНЦІЇ МОЛОДИХ ВЧЕНИХ ТА СТУДЕНТІВ  
ПРИСВЯЧЕНОЇ 150-РІЧЧЮ З ДНЯ НАРОДЖЕННЯ М.О. ВАЛЯШКА

18-19 березня 2021 року  
м. Харків

Харків  
НФаУ  
2021

УДК 615.1

**Редакційна колегія:** проф. Котвіцька А. А., проф. Черних В. П.,  
проф. Владимірова І. М.

**Укладачі:** Сурікова І. О., Литкін Д. В., Смєлова Н. М., Борко Є. А.,  
Куриленко Ю. Є., Гордей К. Р.

Topical issues of new medicines development: матеріали XXVIII Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених та студентів присвяченої 150-річчю з дня народження М.О. Валяшка (18-19 березня 2021 р., м. Харків). – Харків: НФаУ, 2021. – 682 с.

ISSN 2616-6615

Збірка містить матеріали науково-практичної конференції молодих учених та студентів «Topical issues of new medicines development», присвяченої 150-річчю з дня народження М. О. Валяшка, які згруповано за провідними напрямками науководослідної та навчальної роботи Національного фармацевтичного університету. Розглянуто теоретичні та практичні аспекти синтезу біологічно активних сполук і створення на їх основі лікарських субстанцій; стандартизації ліків, фармацевтичного та хіміко-технологічного аналізу; вивчення рослинної сировини та створення фітопрепаратів; сучасної технології ліків та екстемпоральної рецептури; біотехнології у фармації; досягнень сучасної фармацевтичної мікробіології та імунології; доклінічних досліджень нових лікарських засобів; фармацевтичної опіки рецептурних та безрецептурних лікарських препаратів; доказової медицини; сучасної фармакотерапії, соціально-економічних досліджень у фармації, маркетингового менеджменту та фармакоекономіки на етапах створення, реалізації та використання лікарських засобів; управління якістю у галузі створення, виробництва й обігу лікарських засобів; інформаційних технологій у фармації та медицині; основ педагогіки та психології; суспільствознавства; філології. Для широкого кола наукових і практичних працівників фармації та медицини.

УДК 615.1

ISSN 2616-6615

© НФаУ,  
2021

# SYNTHESIS AND PROPERTIES OF SOME S-ALKYLDERIVATIVES 4-PHENYL-5-((5-PHENYLAMINO-1,3,4-THIADIAZOLE-2-YLTHIO)METHYL)-1,2,4-TRIAZOLE-3-THIONE

Fedotov S. O.

Scientific supervisor: Hotsulya A. S.

Zaporizhzhia State Medical University, Zaporizhzhia, Ukraine

serjioolegovich@gmail.com

**Introduction.** The chemistry and pharmacological properties of thiadiazole and 1,2,4-triazole derivatives are promising and relevant, which is due to the significant success of the development of new drugs based on them. The combination of these heterocycles in one molecule allows to increase the probability of detection among the synthesized compounds of substances with a certain type of biological activity.

**The aim of the work** was the synthesis and study of the properties of S-alkyl derivatives of 5-R-4-phenyl-1,2,4-triazole-3-thione, which contain in its structure 1,3,4-thiadiazole fragment, as well as the prediction of possible biological activity to assess the viability of further in vivo and in vitro studies

**Materials and methods.** As the starting compound, 4-phenylthiosemicarbazide was used, which in the DMF medium, when mixed with carbon disulfide, formed 5-phenylamino-1,3,4-thiadiazole-2-thione. The resulting reaction product was subjected to alkylation with prop-2-yl ester of 2-chloroethanoic acid followed by hydrazinolysis, nucleophilic addition of phenylisothiocyanate and intramolecular alkaline heterocyclization.

The study of physico-chemical properties of the obtained compounds was carried out using methods listed in the State Pharmacopoeia of Ukraine. Melting points were determined in open capillary tubes in a "Stanford Research Systems Melting Point Apparatus 100" (SRS, USA). The elemental analysis (C, H, N, S) were performed using the "Elementar vario EL cube" analyzer (Elementar Analysensysteme, Germany) (Table 1). IR spectra ( $4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$ ) were taken off the module ALPHA-T of Bruker ALPHA FT-IR spectrometer (Bruker optics, Germany).  $^1\text{H}$  NMR spectra (400 MHz) were recorded at "Varian-Mercury 400" spectrometer with  $\text{SiMe}_4$  as internal standard in  $\text{DMSO}-d_6$  solution. Chromatography-mass spectral studies were conducted on the instrument "Agilent 1260 Infinity HPLC" equipped with a mass spectrometer "Agilent 6120" (method of ionization – electrospray (ESI)).

Alkylderivatives of 4-phenyl-5-((5-(phenylamino-1,3,4-thiadiazole-2-ylthio)methyl)-1,2,4-triazole-3-thione. To a previously obtained solution of 0.005 mol sodium hydroxide and 0.005 mol of 4-phenyl-5-((5-(phenylamino-1,3,4-thiadiazole-2-ylthio)methyl)-1,2,4-triazole-3-thione in 30 ml propane-1-ol was added an equivalent amount of haloalkanes.

**Results and discussion.** Optimized method for obtaining 4-phenyl-5 - ((5-phenylamino-1,3,4-thiadiazol-2-ylthio) methyl) -1,2,4-triazole-3-thione. The optimal conditions for the synthesis of S-alkyl derivatives of 4-phenyl-5 - ((5-phenylamino-1,3,4-thiadiazol-2-ylthio) methyl) -1,2,4-triazole-3-thione were determined, the structure of the obtained substances was established. and their physical properties were investigated. With the help of computer forecasting "PASS On-line®" the perspective direction of further researches of biological activity of target products of reaction is defined.

**Conclusions.** A number of S-alkyl derivatives of 4-phenyl-5 - ((5-phenylamino-1,3,4-thiadiazol-2-ylthio) methyl) -1,2,4-triazole-3-thione were synthesized, the structure of which was confirmed by physicochemical methods of analysis. At the next stages of research it is planned to establish indicators of antimicrobial activity of the synthesized substances.