

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ



ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ



XV Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів

ХІМІЧНІ КАРАЗІНСЬКІ ЧИТАННЯ – 2023

24–26 квітня 2023

ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Харків – 2023

УДК 54 (063)
Х 46

Реєстраційне посвідчення у ДНУ «УкрІНТЕІ» МОН України (№ 621 від 22 грудня 2022 р.)

Затверджено до друку рішенням науково-методичної ради Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна (протокол № 2 від 16.04.2023р.)

Тези доповідей представлені за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Для науковців та студентів ВНЗ та НДІ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

ISBN 978-966-285-637-8

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2023



ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ імені В. Н. КАРАЗІНА

СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ N-(3-(3-МЕТИЛПІРАЗОЛ-5-ІЛ)-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[3,4-b][1,3,4]ТІАДІАЗОЛ-6-ІЛ)БЕНЗАМІДУ ТА ЙОГО ПОХІДНИХ

Федотов С. О., Гоцуля А. С.

Запорізький державний медичний університет

serjioolegovich@gmail.com

Створення перспективних та практично значимих гетероциклічних систем за участю 1,2,4-триазолу є обґрунтованим напрямком наукової роботи. Значні можливості хімічних перетворень, доступність реакцій поєднання з різноманітними синтонами, висока вірогідність проявлення біологічних властивостей лише посилюють актуальність створення похідних зазначеного гетероциклу [1].

Отже, синтез та дослідження властивостей нових похідних 1,2,4-триазолу мають великий науковий потенціал та є важливими для розвитку вітчизняної хімічної та фармацевтичної галузей [2].

Метою роботи було встановлення оптимальних умов синтезу та дослідження ряду властивостей продуктів взаємодії 4-аміно-5-(3-метилпіразол-5-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу з ароматичними ізотіоціанатами.

Матеріали та методи. Перший етап роботи передбачав ресинтез 4-аміно-5-(3-метилпіразол-5-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу з використанням в якості вихідних сполук діетилоксалату, ацетону та натрій метилату. Як проміжні продукти хімічного перетворення були одержанні етиловий ефір 2,5-діоксопентанової кислоти та в подальшому в результаті поетапної взаємодії з гідразином перетворено у 3-метилпіразол-5-карбогідразид. Синтезований гідразид у реакції з сірковуглецем у водно-спиртовому розчині калій гідроксиду було перетворено на калій 2-(3-метилпіразол-5-карбоніл)гідразин-1-карбодитіоат, який піддавався внутрішньомолекулярній гетероциклізації (рис. 1).

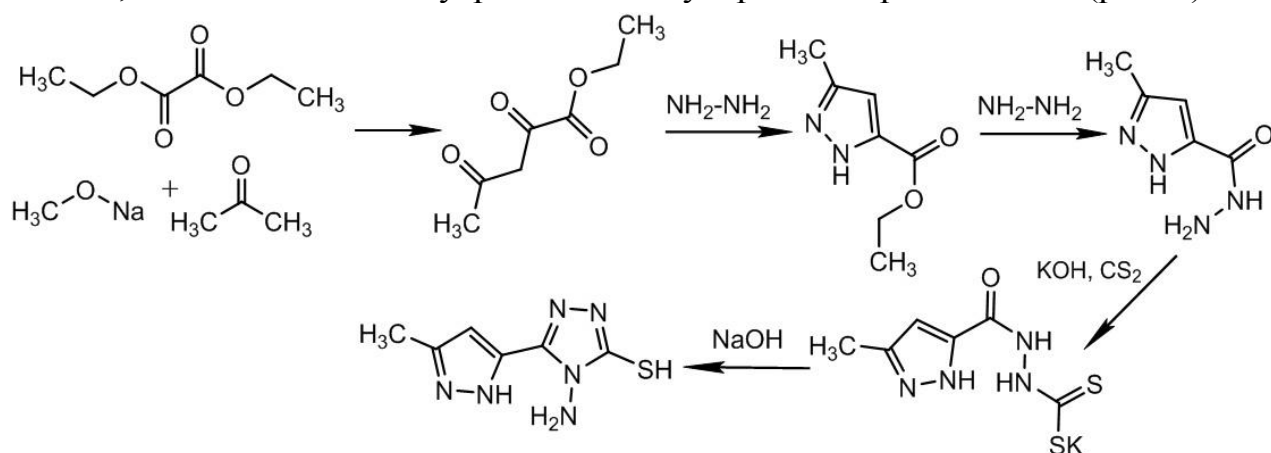


Рис. 1. Схема синтезу 4-аміно-5-(3-метилпіразол-5-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолу

Наступним етапом роботи був синтез заміщених ізотіоціанатів. З цією метою використовували хлорангідриди карбонових кислот, які реагуючи з роданідом калія в середовищі ацетонітрилу, утворювали відповідні ізотіоціанати (рис. 2).

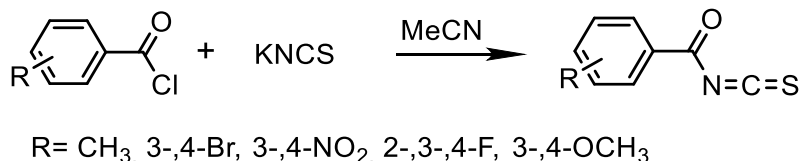


Рис. 2. Синтез R-бензоїлізотіоціанатів

Одержані R-бензоїлізотіоціанати в подальшому були використані в реакції з 4-аміно-5-(3-метилпіразол-5-іл)-1,2,4-триазол-3-тіолом, що супроводжується трансформацією у N-(3-(3-метилпіразол-5-іл)-[1,2,4]триазоло-[3,4-b][1,3,4]тіадіазол-6-іл)бензамід та відповідні його похідні (рис. 3).

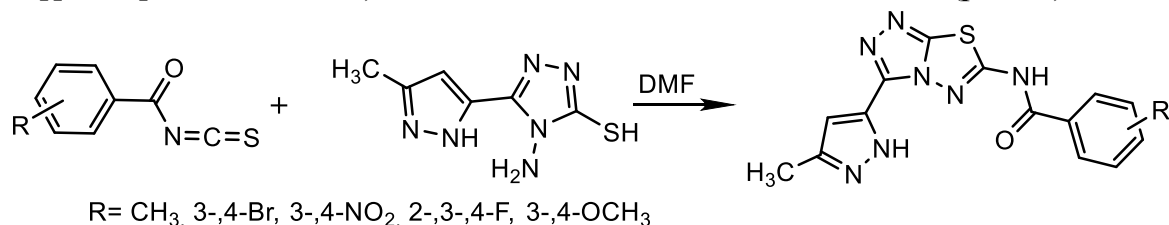


Рис. 3. синтез вихідних N-(3-(3-метилпіразол-5-іл)-[1,2,4]триазоло-[3,4-b][1,3,4]тіадіазол-6-іл)бензамід

Структуру вихідних сполук встановлювали комплексом сучасних фізико-хімічних методів аналізу.

Прескринінгові дослідження *in silico* з використанням ADME аналізу дозволили попередньо спрогнозувати загальні фармакокінетичні параметри та визначитись з відповідністю основним критеріям лікоподібності. Також цим методом встановлена доцільність дослідження впливу синтезованих сполук на ацетилхолінестеразу. Методом молекулярного докінгу обґрунтовано доцільність подальших досліджень ряду синтезованих сполук на протигрибкову та антимікробну активність.

Висновки. Синтезовано N-(3-(3-метилпіразол-5-іл)-[1,2,4]триазоло-[3,4-b][1,3,4]тіадіазол-6-іл)бензамід та ряд його похідних як вірогідно потенційних протигрибкових, антимікробних та антихолінестеразних агентів.

- [1] Othman, A. A., Kihel, M., Amara, S. (2019). 1,3,4-Oxadiazole, 1,3,4-thia-diazole and 1,2,4-triazole derivatives as potential antibacterial agents. *Arabian Journal of Chemistry*, 12 (7), 1660-1675. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2014.09.003>
- [2] Zvenihorodska, T., Hotsulia, A., Kravchenko, S., Fedotov, S., Kyrychko, B. (2021). Synthesis and antimicrobial action of 1,2,4-triazole derivatives containing theophylline and 1,3,4-thiadiazole fragments in their structure. *African Journal of Biomedical Research*, 24 (1), 159-163. <https://www.ajol.info/index.php/ajbr/article/download/209113/197153>.