

Дьячкова Е.А.
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СОЛЕЙ 2-(5-((ТЕОФИЛЛИН-7'-ИЛ)МЕТИЛ)-4-МЕТИЛ-4*H*-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ИЛТИО)АЦЕТАТНОЙ КИСЛОТЫ

Научный руководитель ст. преп., к. фарм. н. Гоцуля А. С.
Кафедра токсикологической и неорганической химии
Запорожский государственный медицинский университет
г. Запорожье

Актуальность. Если рассматривать азотсодержащие гетероциклы, например, производные 1,2,4-триазола, то можно сделать вывод о том, что введение в эту систему алифатических, ароматических, гетероциклических заместителей потенциально может привести к появлению новых молекул биологически активных веществ. Анализ публикаций за последние годы указывает на целесообразность синтеза соединений этого ряда на основе уже известных закономерностей между строением и биологической активностью производных 1,2,4-триазола.

Цель. Синтез и изучение свойств солей 2-(5-((теофиллин-7'-ил)метил)-4-метил-4*H*-1,2,4-триазол-3-илтио)ацетатной кислоты.

Задачи:

1) Получить исходное соединение - 7-((3-тио-4-метил-1,2,4-триазол-3-ил)метил)теофиллин по общеизвестным методикам.

2) Синтез, доказательство структуры и предварительное прогнозирование биологической активности 2-(5-((теофиллин-7'-ил)метил)-4-метил-4*H*-1,2,4-триазол-3-илтио)ацетатной кислоты и ее солей.

Материалы и методы. Температура плавления, УФ- и ИК-спектрофотометрия, ¹H ЯМР-спектроскопия, элементный анализ и хромато-масс-спектрометрия, компьютерная программа «PASS Online[®]».

Результаты и их обсуждения. Синтезированы 2-(5-((теофиллин-7'-ил)метил)-4-метил-4*H*-1,2,4-триазол-3-илтио)ацетатная кислота и 12 ее солей с органическими и неорганическими основаниями. Строение полученных соединений установлено с помощью физико-химических методов анализа. Полученные соединения были использованы для предварительного прогнозирования их биологической активности с помощью компьютерной программы «PASS Online[®]».

Выводы.

1) Получены 12 солей 2-(5-((теофиллин-7'-ил)метил)-4-метил-4*H*-1,2,4-триазол-3-илтио)ацетатной кислоты.

2) Доказано строение синтезированных соединений с помощью современных физико-химических методов.

3) Проведено предварительное прогнозирование их биологической активности с помощью программы «PASS Online[®]».