

Кочнева Е. В.

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗОЛА

Научный руководитель ст. преп., к. фарм. наук Гоцуля А. С.

Кафедра токсикологической и неорганической химии

Запорожский государственный медицинский университет

г. Запорожье

Актуальность. Факт того, что фрагмент 1,2,4-триазола имеет небольшой размер и при этом сразу три атома азота в своей структуре, а также увеличивает растворимость в воде соединений, в состав которых он входит, не мог не привлечь внимание учёных всего мира. На сегодняшний день этот гетероцикл входит в состав многих лекарственных препаратов. Именно широкой спектр биологической активности обуславливает особую привлекательность соединений, содержащих 1,2,4-триазольную систему.

Цель: поиск биологически активных веществ среди теофиллинпроизводных 1,2,4-триазол-3-тиола.

Задачи:

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

2 Получение алкил-, арил- и гетерилпроизводных исходного соединения.

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

Результаты и их обсуждения. Соответствие действительной структуры веществ и предусмотренной была подтверждена с помощью элементного анализа, ИК-спектрофотометрии, УФ-спектрофотометрии, ¹H ЯМР-спектрометрии; также установлена температура плавления.

Посредством использования метода хромато-масс-спектрометрии была доказана индивидуальность синтезированных нами соединений. С целью определения фармакологического потенциала полученных соединений проведено виртуальный скрининг с помощью программного продукта «PASS». Также они были исследованы на острую токсичность благодаря программы «GUSAR».

Выводы.

1 Получено исходное соединение, а впоследствии 13 алкил-, арил и гетерилпроизводные.

2 При помощи современных физико-химических методов подтверждено строение полученных соединений.

3 Проведено предварительное прогнозирование их биологической активности с помощью скрининговых программных продуктов.