

Федотов С. О.

**5-ЦИКЛОПРОПИЛ-4-ФЕНИЛ -4H-1,2,4-ТРИАЗОЛ -3-ТИОЛ И ЕГО
ПРОИЗВОДНЫЕ: СИНТЕЗ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ**

Научный руководитель: канд. фарм. наук, доц. Гоцуля А. С.

Кафедра токсикологической и неорганической химии

Запорожский государственный медицинский университет, г. Запорожье

Актуальность. Актуальным направлением химии гетероциклических соединений остается выявление биологической активности среди алкил-, арил- и гетерилпроизводных 1,2,4-триазола-3-тиола, которые нашли широкое применение в медицине, фармации и в иных сферах жизнедеятельности человека.

Цель: разработка и целенаправленный синтез производных 5-циклопропил-4-фенил-4H-1,2,4-триазол-3-тиола с последующим прогнозированием *in silico* возможной биологической активности полученных веществ.

Материалы и методы. В качестве промежуточного интермедиата был выбран 5-циклопропил-4-фенил-4H-1,2,4-триазол-3-тиол, который был ресинтезирован по описанным по известным методикам с использованием в качестве исходного вещества циклопропилкарбонной кислоты. Полученный исходный тиол в дальнейшем был использован для реакций S-алкилирования различными галогенсодержащими соединениями (галогеналканы и галогенкетоны). Структура полученных соединений была установлена с помощью ¹H ЯМР-спектromетрии, УФ- и ИК-спектрофотометрии, а также элементным анализом. Индивидуальность подтверждена методом хромато-масс-спектрометрии. Предварительное прогнозирование острой токсичности и биологической активности проводилось с использованием сервисов «PASS Online[®]» и «GUSAR Online[®]».

Результаты и их обсуждение. Создано ряд синтетических производных 5-циклопропил-4-фенил-4H-1,2,4-триазол-3-тиола, для которых *in silico* спрогнозирована острая токсичность и возможные виды биологической активности (противомикробная, противогрибковая, противовоспалительная и другие), что дает возможность в дальнейшем выявить приоритетное направление в поиске биологически активных веществ среди производных изучаемой гетероциклической системы.

Выводы. Осуществлен синтез 12 соединений, для которых изучены спектральные характеристики, установлены некоторые физико-химические константы и доказана структура. Предварительно с помощью компьютерного моделирования предсказана принадлежность полученных веществ к классу малотоксичных или практически нетоксичных. Установлена перспективность поиска среди синтезированных структур веществ с антимикробной, противогрибковой и противовоспалительной активностью.