

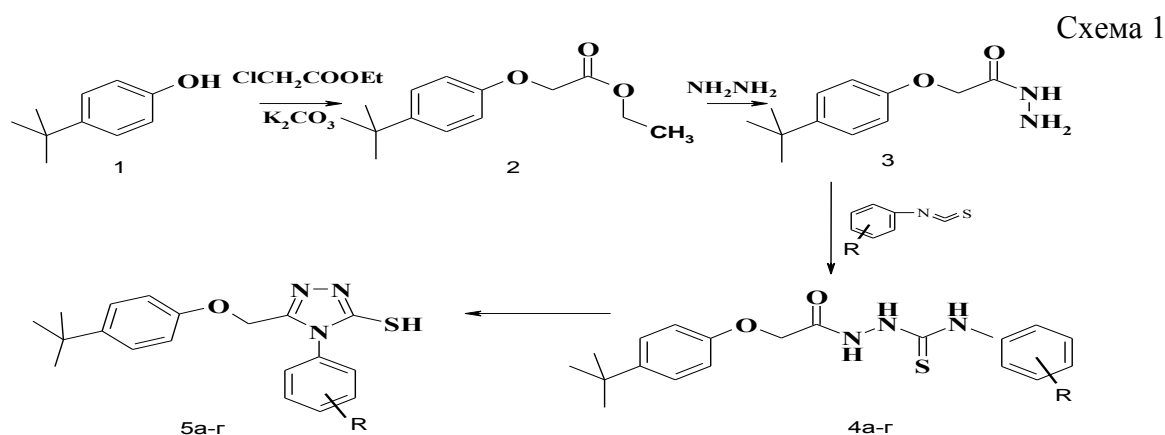
ХИМИЯ – БИОЛОГИЯ

СИНТЕЗ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРОГНОЗ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3- МЕРКАПТО-4-АРИЛ-5-(4-ТРЕТ-БУТИЛ)ФЕНИЛОКСИМЕТИЛ-1,2,4- ТРИАЗОЛА(4*H*)

Н.Б.Саидов, И.М.Кадамов, В.А.Георгиянц, П.А.Безуглый
Таджикский национальный университет,
Национальный фармацевтический университет, г.Харьков

Гетероциклическая система 1,2,4-триазола привлекает сегодня внимание огромного количества ученых по всему миру. Изучение этой системы обусловлено несколькими причинами. Во-первых, она интересна в плане химических преобразований и формирования ядра, высокого потенциала в синтезе конденсированных гетероциклических систем, способностью к изомерии в зависимости от введения заместителей. Во-вторых, интерес к производным 1,2,4-триазола подпитан немалым количеством лекарственных препаратов, созданных на его основе. Среди них такие известные препараты как противогрибковые флуконазол и итраконазол [1,2], антибактериальное средство, используемое в комбинации с β -лактамными антибиотиками тазобактам [3], антиконвульсант руфинамид [4]. Важными для медицинской практики являются препарат против мигрени ризатриптан [5], антидепрессант тразодон [6] противовирусный рибавирин [7]. Для некоторых видов действия, например, противогрибкового, присутствие триазольного кольца является ключевым для проявления активности. Подобие структуры триазола молекуле гистамина создает предпосылки для поиска веществ противоязвенного и антигистаминного действия.

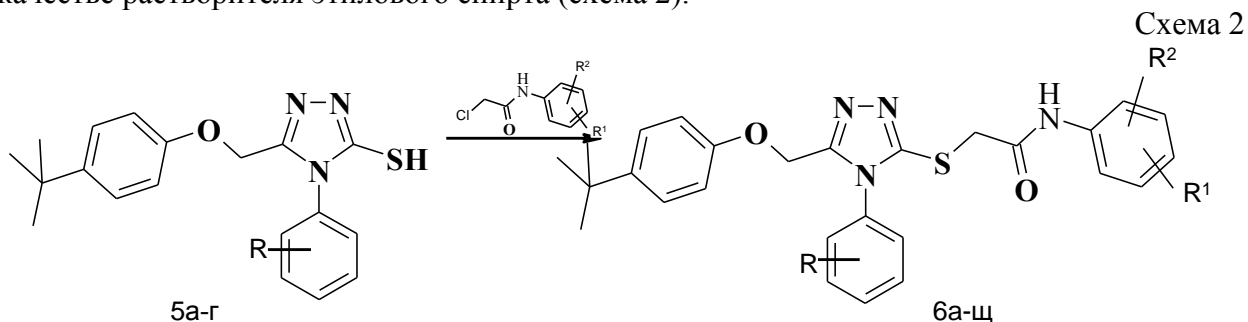
Ранее нами были синтезированы различные производные 3-меркапто-1,2,4-триазола (4*H*), содержащие в 5 положении ариламинометильный и арилтиометильный остатки, а в 4 положении – фенильный или бензильный радикал [8-10]. Меркаптогруппа во всех соединениях была алкилирована производными хлоруксусной кислоты или бромацетофенонами. Продолжая исследования в этом направлении, мы запланировали синтез структурных аналогов с арилоксиметильным заместителем в 5 положении и арильным – в четвертом. Как известно, для воздействия на организм в большинстве случаев молекула должна обладать липофильными свойствами. Однако, в запланированных для синтеза структурах содержится большое количество гидрофильных групп – гидроксильная, меркапто, гетероциклические атомы азота. Желая повысить липофильные свойства, кроме ацилирования меркаптогруппы и арирования триазольного кольца, мы избрали в качестве исходного фенола пара-третбутильное производное **1**. Синтез исходных 3-меркаптотриазолов **5** осуществляли в соответствии со схемой 1.



В соответствии с этой схемой исходный фенол **1** алкилировали этилхлорацетатом в среде этанола в присутствии полуэквимолярного количества поташа. Полученный в результате алкилирования эфир **2** подвергали гидразинолизу, после чего конденсировали с

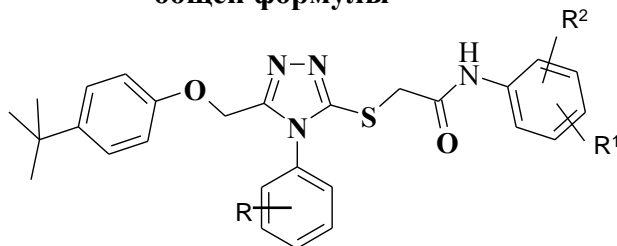
арилизотиоцианатами. Полученные тиосемикарбазиды 4 циклизовали в целевые 3-меркапто-4-арил-5-(4-трет-бутил)фенилоксиметил-1,2,4-триазолы(4Н) 5.

Дальнейшее алкилирование ключевых интермедиатов – 3-меркапто-4-арил-5-(4-третбутил)фенилоксиметил-1,2,4-триазолов(4Н) 5 арил(алкил)амидами хлоруксусной кислоты осуществляли в условиях основного гомогенного катализа с использованием в качестве растворителя этилового спирта (схема 2).



Основные условия создавались добавлением каталитических количеств спиртового раствора щелочи. Предложенные условия позволили получить целевые продукты реакции 6а-щ с высоким выходом и достаточной степенью чистоты (табл.1)

Таблица 1. Структура, выходы и температуры плавления синтезированных веществ общей формулы



| Соединение | R | R ¹ | R ² /R ³ | Выход, % | Т.пл., °С |
|------------|------|----------------|--------------------------------|----------|-----------|
| 6а | H | H | H | 82,9 | 192-3 |
| 6б | H | H | 3-Me | 78,2 | 156-8 |
| 6в | H | H | 1-naphthyl | 74,4 | 143-5 |
| 6г | H | 3-Cl | 2-Me | 69,7 | 130-2 |
| 6д | H | 4-Me | 2-Me; 6-Me | 64,1 | 195-7 |
| 6е | 2-Me | H | 4-Me | 71,4 | 190-2 |
| 6ж | 2-Me | H | 4-Me | 72,4 | 179-81 |
| 6з | 2-Me | 4-Me; | 2-Me; 6-Me | 77,8 | 160-2 |
| 6и | 2-Me | 4-Cl | 3-Cl | 68,9 | 168-70 |
| 6к | 2-Me | 6-Cl | 2-Cl | 71,1 | 172-4 |
| 6л | 3-Me | H | 4-OPh | 73,1 | 154-6 |
| 6м | 3-Me | H | 3-Me | 63,5 | 162-4 |
| 6н | 3-Me | 4-Me | 2-Me | 71,4 | 154-6 |
| 6о | 3-Me | 5-OMe | 2-OMe | 72,3 | 121-3 |
| 6п | 3-Me | 6-Cl | 2-Cl | 74,4 | 140-2 |
| 6р | 4-Me | H | H | 77,1 | 187-9 |
| 6с | 4-Me | H | 3-Me | 74,9 | 166-8 |
| 6т | 4-Me | H | 4-OPh | 76,8 | 135-7 |
| 6у | 4-Me | H | 4-Me | 77,3 | 215-7 |
| 6ф | 4-Me | H | 4-COOMe | 64,4 | 195-7 |
| 6х | 4-Me | 4-Me | 2-Me | 69,5 | 141-2 |
| 6ц | 4-Me | 4-Me | 2-Me; 6-Me | 71,2 | 192-4 |
| 6ч | 4-Me | H | 2-Cl | 68,7 | 155-7 |
| 6ш | 4-Me | 4-Cl | 3-Cl | 73,9 | 170-2 |
| 6щ | 4-Me | 6-Cl | 2-Cl; | 64,1 | 240-2 |

Структуру синтезированных соединений мы подтверждали данными элементного анализа и спектроскопии ПМР (Табл.2).

Анализ ПМР-спектров позволил выделить в них общие сигналы протонов, соответствующие базовой структуре. В частности, все спектры содержат синглетный сигнал амидных протонов в области 9,40-10,51 м.д. Кроме того, характерным является присутствие двух синглетных сигналов метиленовых групп, которые были интерпретированы нами в соответствии с электроотрицательностью соседних атомов, таким образом – сигналы при 4,95-5,03 м.д. были приписаны присутствию группы OCH_2 ; при 4,07-4,22 м.д. – группы SCH_2 . Метильные группы трет-бутильного остатка проявляются на спектрах в виде одного синглетного сигнала с интенсивностью в 9 протонов при 1,19-1,25 м.д.. Сигналы протонов ароматических заместителей в большинстве случаев накладываются друг на друга и выглядят как сложный мультиплет с соответствующей интенсивностью на участке спектра от 6,71 до 8,25 м.д.

Кроме этих, в сильных полях наблюдаются сигналы протонов введенных в ароматические фрагменты заместителей, в большинстве случаев – метильных или метоксильных (Табл.2).

Все синтезированные соединения были подвергнуты нами предварительному прогнозу фармакологической активности с использованием программы PASS [11, 12]. Вопреки ожиданиям, вместо обычно прогнозируемых для производных 1,2,4-триазола видов активности – противогрибковой, противоязвенной, антигистаминной, для этой группы соединений наиболее вероятной оказалась гипохолестеринемическая активность и антиатеросклеротическая. На основании полученных данных были отобраны наиболее перспективные вещества для фармакологического скрининга.

Экспериментальная часть. Спектры ЯМР ^1H синтезированных соединений записаны на приборе Bruker-300, рабочая частота 300 МГц, растворитель $\text{DMCO-}d_6$, внутренний стандарт – ТМС. Данные элементного анализа соответствуют рассчитанным. Чистоту синтезированных соединений контролировали методом ТСХ в системе н-бутанол-уксусная кислота-вода 10:40:1.

3-Меркапто-4-фенил-5-(4'-трет-бутил)фенил оксиметил-1,2,4-триазол(4Н) (5а). К раствору 0.1 Моль гидразида (4'-трет-бутил)фенил оксисукусной кислоты **3** в 100 мл этанола при интенсивном перемешивании приливали по каплям 0.1 Моль фенилизотиоцианата. Реакционную смесь кипятили с обратным холодильником 1 час, охлаждали, образовавшийся осадок замещенного тиосемикарбазида **4** отфильтровывали и сушили. К суспензии 0.01 Моль тиосемикарбазида **4** в 80 мл воды добавляли 0.02 Моль КОН. Реакционную смесь кипятили с обратным холодильником 5 часов. По охлаждении подкисляли соляной кислотой до $\text{pH}=3-4$. Образовавшийся осадок меркаптотриазола **5** отфильтровывали, промывали водой, сушили.

Выход 2,12 г. Т.пл. 182-4°C (этанол).

Спектр ПМР, $\text{DMCO-}d_6$, δ , м.д.: 13,74, 1H, с, (SH); 1,22, 9 H, с (трет-бутил); 7,02-7,64, 9H, м (Ar-H); 4,94, 2H, с (OCH_2).

3-Меркапто-4-(2'-метил)фенил-5-(4'-трет-бутил)оксиметил-1,2,4-триазол(4Н) (5б). Синтезирован аналогично.

Выход 2,23 г. Т.пл. 162-4°C (этанол).

Спектр ПМР, $\text{DMCO-}d_6$, δ , м.д.: 13,71, 1H, с, (SH); 1,21, 9 H, с (трет-бутил); 6,98-7,71, 8H, м (Ar-H); 5,01, 2H, с (OCH_2).

3-Меркапто-4-(3'-метил)фенил-5-(4'-трет-бутил)оксиметил-1,2,4-триазол(4Н) (5в). Синтезирован аналогично.

Выход 2,01 г. Т.пл. 151-3°C (этанол).

Спектр ПМР, $\text{DMCO-}d_6$, δ , м.д.: 13,72, 1H, с, (SH); 1,22, 9 H, с (трет-бутил); 6,92-7,66, 8H, м (Ar-H); 5,01, 2H, с (OCH_2).

3-Меркапто-4-(4'-метил)фенил-5-(4'-трет-бутил)оксиметил-1,2,4-триазол(4Н) (5г). Синтезирован аналогично.

Выход 2,19 г. Т.пл. 179-81°C (этанол).

Спектр ПМР, $\text{DMCO-}d_6$, δ , м.д.: 13,72, 1H, с, (SH); 1,21, 9 H, с (трет-бутил); 7,21, 4H, дд, 7,48, 4H, дд (Ar-H); 5,01, 2H, с (OCH_2).

Анилиды 4-фенил-5-фенилтиометилтриазолил-3-илмеркаптоуксусной кислоты (9а-у, табл. 1) (общая методика).

К раствору 0.002 Моль меркаптотриазола **5** в 20 мл этанола приливали 20 мл водного раствора 0.002 моль КОН. К полученной реакционной смеси при перемешивании приливали спиртовой раствор 0.002 Моль соответствующего арилхлорацетамида. Полученный раствор кипятили с обратным холодильником 1 час, охлаждали, выливали в

200 мл воды. Выпавший осадок целевого продукта **6** отфильтровывали, сушили. Перекристаллизовывали из этанола.

Выводы.

1. Разработана препаративная методика синтеза 3-меркапто-4-(R-фенил)-5-(4'-трет-бутил)-феноксиметил-1,2,4-триазолов(4*H*) и продуктов их алкилирования анилидами хлоруксусной кислоты.

2. Структура синтезированных соединений подтверждена данными элементного анализа и спектроскопии ПМР, чистота – методом ТСХ

3. Прогноз фармакологической активности синтезированных соединений показал вероятность проявления ими нехарактерной для производных 1,2,4-триазола видов активности – антиатеросклеротической и гипохолестеринемической.

4. На основании проведенного прогнозирования активности отобранный вещества для фармакологического скрининга.

Таблица 2. Химические сдвиги в сигналах протонов в спектрах ПМР синтезированных соединений (δ, м.д)

| | CONH, 1H, с | Ar-H, м | OCH ₂ , 2H, с | S-CH ₂ , 2H, с | t-Bu, 9H, с | Сигналы протонов заместителей |
|----|----------------|-------------------|-----------------------------|------------------------------|----------------|--|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 6а | 10,21 | 6,71-7,68, 14H | 5,02 | 4,18 | 1,24 | - |
| 6б | 10,07 | 6,71-7,48, 13H | 4,98 | 4,07 | 1,24 | 2,31, 3H, с (CH ₃) |
| 6в | 10,25 | 6,78-8,25, 16H | 5,01 | 4,22 | 1,24 | - |
| 6г | 9,80 | 6,87-7,54, 12H | 5,03 | 4,14 | 1,21 | 2,21, 3H, с (CH ₃) |
| 6д | 9,40 | 6,73-7,58, 11H | 5,01 | 4,11 | 1,23 | 2,05, 6H, с (2xCH ₃); 2,22, 3H, с (CH ₃) |
| 6е | 10,25 | 6,72-7,58, 17H | 4,95 | 4,16 | 1,22 | 2,02, 3H, с (CH ₃) |
| 6ж | 10,11 | 6,78-7,47, 12H | 4,97 | 4,15 | 1,22 | 2,02, 3H, с (CH ₃); 2,22, 3H, с (CH ₃) |
| 6з | 9,42 | 6,74-7,48, 10H | 4,95 | 4,15 | 1,22 | 2,02, 9H, с (3xCH ₃); 2,22, 3H, с (CH ₃) |
| 6и | 10,51 | 6,72-7,89, 11H | 4,95 | 4,18 | 1,22 | 2,02, 3H, с (CH ₃) |
| 6к | 10,15 | 6,71-7,49, 11H | 4,95 | 4,21 | 1,22 | 2,02, 3H, с (CH ₃) |
| 6л | 10,25 | 6,77-7,58, 17H | 5,01 | 4,11 | 1,21 | 2,31, 3H, с (CH ₃) |
| 6м | 10,19 | 6,77-7,42, 12H | 5,00 | 4,13 | 1,21 | 2,29, 3H, с (CH ₃); 2,34, 3H, с (CH ₃) |
| 6н | 9,64 | 6,73-7,38, 11H | 5,02 | 4,16 | 1,23 | 3,15, 9H, с, 3xCH ₃ |
| 6о | 9,65 | 6,59-7,76, 11H | 5,01 | 4,18 | 1,25 | 2,35, 3H, с (CH ₃); 3,68, 3H, с (OCH ₃); 3,77, 3H, с (OCH ₃) |
| 6п | 10,08 | 6,89-7,64, 11H | 5,01 | 4,12 | 1,21 | 2,34, 3H, с (CH ₃) |
| 6р | 10,22 | 6,77-7,55, 13H | 4,98 | 4,11 | 1,22 | 2,38, 3H, с (CH ₃) |
| 6с | 10,20 | 6,76-7,38, 12H | 4,98 | 4,12 | 1,19 | 2,27, 3H, с (CH ₃); 2,36, 3H, с (CH ₃) |
| 6т | 10,28 | 6,78-7,68, 17H | 4,98 | 4,11 | 1,23 | 2,45, 3H, с (CH ₃) |
| 6у | 10,12 | 6,78-7,43, 12H | 4,98 | 4,11 | 1,23 | 2,24, 3H, с (CH ₃); 2,38, 3H, с (CH ₃) |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| 6ф | 10,41 | 6,78-7,91, 12H | 4,98 | 4,18 | 1,22 | 2,35, 3H, с (CH ₃); 3,82, 3H, с (COOCH ₃) |
| 6х | 9,51 | 6,78-7,38, | 4,99 | 4,12 | 1,22 | 2,12, 3H, с (CH ₃); 2,25, 3H, с |

| | | | | | | |
|----|-------|-------------------|------|------|------|--|
| | | 11H | | | | (CH ₃); 2,39, 3H, c (CH ₃) |
| бц | 9,41 | 6,78-7,37, 10H | 5,01 | 4,11 | 1,24 | 2,04, 6H, c (2xCH ₃); 2,22, 3H, c (CH ₃); 2,41, 3H, c (CH ₃) |
| бч | 9,95 | 6,78-7,99, 12H | 4,98 | 4,18 | 1,20 | 2,33, 3H, c (CH ₃) |
| бш | 10,51 | 6,68-7,89, 11H | 4,98 | 4,11 | 1,21 | 2,35, 3H, c (CH ₃) |
| бщ | 10,18 | 6,78-7,61, 10H | 4,99 | 4,19 | 1,25 | 2,36, 3H, c (CH ₃) |

ЛИТЕРАТУРА

1. Weekly fluconazole therapy for recurrent vulvovaginal candidiasis: a systematic review and meta-analysis / M. I. Rosa, B. R. Silva, P. S. Pires et al. // Eur. J. Obstetrics Gynecol. Repr. Biol. – 2013. – Vol. 167, № 2. – P. 132-136.
2. Pharmacological interactions of anti-microbial agents in odontology / G. Gómez-Moreno, J. Guardia, A. Cutando, J. L. Calvo-Guirado // Med. Oral. Patol. Oral. Cir. Bucal. – 2009. – Vol. 14, № 3. – P. 123-8.
3. Tazobactam is a potent inactivator of selected inhibitor-resistant class A β -lactamases Original Research Article / R.A Bonomo, S.A. Rudin, D.M. Shlaes // FEMS Microbiol. Lett. – 1997. - Vol. 148, № 1. – P. 59-62.
4. Arroyo S. Rufinamide // Neurotherapeutics. – 2007. – Vol. 4, № 1. – P. 155-162.
5. Migraine treatment outcomes with rizatriptan in triptan-naive patients: a naturalistic study / S. Solomon, B. Frishberg, X.H. Hu et al. // Clin. Ther. – 2001. - Vol. 23, № 6. – P. 886-900.
6. The effects of trazodone on sleep in patients treated with stimulant antidepressants / H. Kaynak, D. Kaynak, E. Gözükrırmızı, C. Guillemineault // Sleep Medicine. – 2004. – Vol. 5, № 1. – P. 15-20
7. Metabolism and antiviral activity of ribavirin / W. B. Parker // Virus Res. – 2005. - Vol. 107, № 2. – P. 165-171.
8. Saidov N.B. Synthesis of the new biological active compounds among derivatives of 3-mercapto-4-benzyl-5-methoxyphenyl-1,2,4(4H)-triazole / N/B/Saidov, I.M.Kadamov, V.A.Georgiyants // Вісник фармації. – 2012. - № 4(72). – С. 22-26.
9. Saidov N/B/ The synthesis of new 3-phenacylmethylthio-4-aryl-5-phenylaminomethyl-1,2,4-triazoles(4H) as potential neurotropic agents / N.B.Saidov, I.M.Kadamov, V.A.Georgiyants // ЖОрФХ. – 2013. – 11, № 1(41). – С. 44-48.
10. Синтез и физико-химические свойства и фармакологический потенциал производных 3-меркапто-4-фенил-5-фенилтиометил-1,2,4-триазола(4H) / Н.Б.Саидов, И.М.Кадамов, В.А.Георгиянц, Н.В.Гарная // Вестник Таджикского национального университета. – 2013. - № 1(102). – С.219-224.
11. In silico fragment-based drug design using a PASS approach / O.A. Filz, A.A. Lagunin, D.A. Filimonov, V.V. Poroikov // SAR QSAR Environ Res. – 2012. – Vol. 23, № 3-4. – P. 279-96.
12. ibmc.msk.ru/PASS/PASSASS.html

СИНТЕЗ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПРОГНОЗ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3-МЕРКАПТО-4-АРИЛ-5-(4'-ТРЕТ-БУТИЛ)ФЕНИЛОКСИМЕТИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛА(4H)

Осуществлен синтез новых потенциальных биологически активных веществ среди производных 3-меркапто-4-замещенного фенил-5-фенилоксиметил-1,2,4(4H)-триазола. Целевые продукты были получены в результате взаимодействия исходных 3-меркапто-4-арил-5-феноксиметил-1,2,4-триазолов (4H) с соответствующими хлорацетанилидами при стандартных условиях алкилирования. Структура синтезированных веществ доказана с помощью элементного анализа и ПМР-спектров. Прогноз фармакологической активности с использованием программы PASS показал высокую вероятность проявления синтезированными соединениями гипохолестеринемической и антиатеросклеротической активности.

Ключевые слова: 3-меркапто-1,2,4-триазол, производные, синтез, прогноз фармакологической активности.

SYNTHESIS, PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES AND PHARMACOLOGICAL ACTIVITY PREDICTION OF NEW DERIVATIVES OF 3-MERCAPTO-4-ARYL-5-(4'-TRET-BUTYL)FENYLOXYMETHYL-1,2,4 -TRIAZOLE(4H)

The synthesis of new potential biologically active substances of the 3- mercapto-4-substituted phenyl-5 fenyloxymethyl -1,2,4 -triazole(4H) has been carried out. The desired products have been synthesised as result of interaction of starting 3-mercapto-4-aryl-5-phenoxyethyl-1,2,4-triazoles (4H) with correspondent chloroacetanilides under standard alkylation conditions. The structure of the compounds synthesized has been proved by elemental analysis and NMR spectra data. Prediction of the pharmacological activity using the PASS program showed a high probability of gipolesteriemicheskoy and antiatherosclerotic activities for compounds synthesized.

Keywords: 3-mercapto-1,2,4-triazoles, synthesis Prediction of the pharmacological activities.

Сведения об авторах: **Н.Б. Саидов** - канд.фарм.наук. доцент, декан медико-фармацевтического факультета Таджикского национального университета. Телефон: (99237)221-43-08 e-mail: narzullo@mail.ru
И.М. Кадамов - ассистент кафедры фармации медико-фармацевтического факультета Таджикского национального университета. Телефон: (992)935053562.regdeptj@mail.ru
В.А. Георгиянц - доктор фармацевтических наук, профессор, заведующая кафедрой фармацевтической химии Национального фармацевтического университета. Телефон: 38050-0841-871, e-mail: vgeor@ukr.net

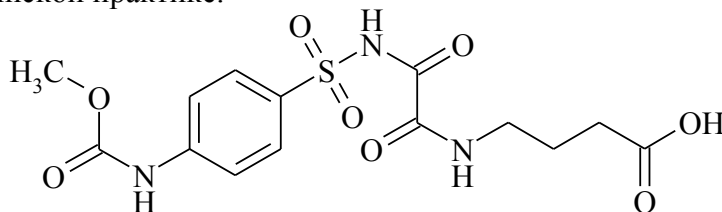
П.А. Безуглый - доктор фармацевтических наук, профессор кафедры фармацевтической химии Национального фармацевтического университета. Телефон: **38050-0841-871**, e-mail: **vgeor@ukr.net**

РАЗРАБОТКА МЕТОДИК КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА МЕТКАРБОСУЛЬФАМИДА – НОВОГО БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНОГО СОЕДИНЕНИЯ

Н.Ю. Бевз, В.А. Георгиянц, П.А. Безуглый
Национальный фармацевтический университет, г. Харьков, Украина

На протяжении последних десятилетий особое внимание ученых уделено поиску биологически активных веществ (БАВ) среди производных дикарбоновых кислот, являющихся естественными метаболитами организма человека и животных. Перспективными для создания лекарственных средств являются аминокислоты, выполняющие в организме важную пластическую и регуляторную функцию. В последние годы ведется интенсивный поиск БАВ среди производных оксамоиламиноуксусной, оксамоиламинокапроновой и других кислот [1-4].

Объединение в одной молекуле остатков щавелевой и γ -аминомасляной кислоты привело к синтезу γ -(4-метоксикарбониламинобензолсульфонилоксамидо)-бутановой кислоты (условное название меткарбосульфамид), которая показала в эксперименте противосудорожную и противовоспалительную активность и является перспективной для применения в медицинской практике.



Поэтому необходимо было более детально изучить физико-химические свойства вещества для дальнейшего составления проекта аналитической нормативной документации.

Для идентификации меткарбосульфида согласно требованиям Государственной фармакопеи Украины (ГФУ) мы использовали физические, физико-химические и химические методы. Исследования проводили с использованием хроматографически чистого образца соединения согласно требованиям ГФУ по разделу «Субстанция» [5,6].

По физическим свойствам анализируемое вещество является белым кристаллическим порошком без запаха. Легко растворим в диметилформамиде, медленно растворим в спирте, практически не растворим в эфире и воде. Растворим в растворах гидроксидов и карбонатов щелочных металлов. Растворимость определяли по методикам ГФУ [6]. Температура плавления составляет от 215°C до 217°C.

Из физико-химических исследований использовали методы абсорбционной спектрофотометрии в ультрафиолетовой и инфракрасной области спектра и спектрометрию ядерного магнитного резонанса. ИК-спектр поглощения субстанции должен соответствовать спектру стандартного образца γ -(4-метоксикарбониламинобензолсульфонил-оксамидо)-бутановой кислоты (рис. 1).