

ЦЕЛЕНАПРАВЛЕННЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СУБСТАНЦИЙ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ 3-МЕРКАПТО-1,2,4-ТРИАЗОЛА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОВРЕМЕННЫХ ПОДХОДОВ

В.А.Георгиянц, Н.Б.Саидов, И.М.Кадамов

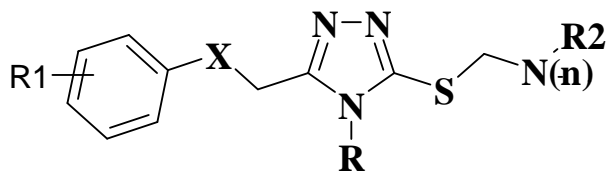
Национальный фармацевтический университет,

г.Харьков, ул.Пушкинская, 53, vgeor@ukr.net

Таджикский национальный университет, г.Душанбе

Современная фармацевтическая химия характеризуется все более прагматичным подходом к синтезу. Широкие возможности планирования эксперимента с использованием не только логико-структурного анализа, но и различных программных продуктов, позволяют сузить ряды потенциальных кандидатов в лидеры, а следовательно, и материальные затраты на синтез. Что касается фармакологического скрининга, то возможность его планирования позволяет экономить не только деньги на проведение экспериментальных исследований, но и уменьшает количество животных, необходимых для использования.

Одним из методов формирования ядра 3-меркапто-1,2,4-триазола(4H) с заместителями в четвертом и пятом положениях, является взаимодействие гидразидов органических кислот с соответствующими изотиоцианатами. При этом заместитель в положении 4 соответствует природе изотиоцианата, а в пятом положении – остатку органической кислоты. С учетом имеющихся в литературе данных о подобных соединениях мы запланировали синтез не описанных ранее веществ I-V



I-V

Для планирования и оптимизации синтеза нами был осуществлен прогноз фармакологической активности 5 полупродуктов – меркаптотриазолов (1-5) и продуктов их алкилирования (I-V) с использованием программы PASS [8]. При этом для статистической достоверности при просчете активности использовали формулы с наиболее доступными радикалами в амидной функции хлоруксусной кислоты, исходных фенолах и анилинах, изотиоцианатах. Интересным оказался факт вероятности достаточно широкого спектра фармакологической активности исходных соединений.