



Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра медичної хімії
Кафедра загальної хімії
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Міжнародна internet-конференція

Modern chemistry of medicines

18 травня 2023 р.
м. Харків, Україна

Повідчення Державної наукової
установи «Український інститут
науково-технічної експертизи та
інформації» № 550 від 19.12.2022 року

Міністерство охорони здоров'я України
Міністерство освіти і науки України
Національний фармацевтичний університет
Кафедра фармацевтичної хімії
Кафедра медичної хімії
Кафедра загальної хімії
Кафедра аналітичної хімії та аналітичної токсикології

Ministry of health of Ukraine
Ministry of education and science of Ukraine
National university of pharmacy
Pharmaceutical chemistry department
Medicinal chemistry department
General chemistry department
Analytical chemistry and analytical toxicology department

MODERN CHEMISTRY OF MEDICINES

Матеріали
Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines»,
18 травня 2023 року

Materials
of the International Internet Conference 'Modern chemistry of medicines',
May 18, 2023

ХАРКІВ
KHARKIV
2023

УДК 615.3(06)

М 78

Електронне видання мережне

Редакційна колегія: проф. Котвіцька А. А., проф. Владимірова І. М., проф. Георгіянц В.А., проф. Перехода Л.О., проф. Журавель І.О., проф. Колісник С.В., доц. Криській О.С., проф. Власов С.В., ас. Смелова Н.М., ас. Григорів Г.В.

Конференція зареєстрована в УкрІНТЕІ (посвідчення № 550 від 19.12.2022 р.)

M78 **Modern** chemistry of medicines: матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) – Електрон. дані. – Х. : НФаУ, 2023. – 284 с. – Назва з тит. екрана.

Збірник містить матеріали Міжнародної Internet-конференції «Modern chemistry of medicines» (18 травня 2023 р., м. Харків) присвячені висвітленню сучасних тенденцій створення оригінальних АФІ синтетичного та рослинного походження, фармацевтичної розробки, забезпечення якості лікарських засобів.

Для широкого кола наукових та практичних фахівців у галузі фармації та медицини, магістрантів, аспірантів, докторантів, співробітників фармацевтичних підприємств, викладачів закладів вищої освіти.

Редколегія не завжди поділяє погляди авторів.

Автори опублікованих матеріалів несуть повну відповідальність за підбір, точність наведених фактів, цитат, економіко-статистичних даних, власних імен та інших відомостей.

Матеріали подаються мовою оригіналу.

УДК 615.3(06)

© НФаУ, 2023

**SYNTHESIS AND STUDY OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF
DERIVATIVE ANALYSIS OF 1-(3-MERCAPTO-5-PHENYL-4H-1,2,4-
TRIAZOL-4-YL)-2-PHENYLETHAN-1-ONE**

Fedotov S. O., Nepochatyh B. A.

*Department of natural sciences for foreign students and toxicological chemistry,
Zaporizhzhia State Medical University*

*Corresponding author e-mail: serjioolegovich@gmail.com

Of particular interest are five-membered heterocycles with three nitrogen atoms - 1,2,4-triazoles, as well as their sulfur-containing derivatives - 1,2,4-triazole-3-thiones. Derivatives of these heterocyclic systems show a wide range of physiological activity, for example: antioxidant, actoprotective, hepato- and cardioprotective, anticancer, antifungal, neuroleptic and other forms of activity. They are used in agriculture and veterinary medicine. The presence in the structure of 1,2,4-triazol-3-thiones of two nucleophilic centers - an exocyclic Sulfur atom and an endocyclic Nitrogen atom forms a certain spectrum of possibilities in the projection of the use of these compounds in interesting directions of the synthesis of new azaheteryl derivatives.

The aim of our research was to generalize the synthesis methods and study the physicochemical properties of 1-(3-mercapto-5-phenyl-4h-1,2,4-triazol-4-yl)-2-phenylethan-1-one derivatives, which in prospects can be used to create a biologically active substance.

Research methods. The first stage of our work was the preparation of acylisothiocyanate. Chloroanhydride of phenylacetic acid was used as the starting component, which reacted with inorganic thiocyanates of ammonium, potassium, or sodium to form acylisothiocyanate. The reaction is mostly carried out by heating in an acetonitrile medium. Further, the obtained acylisothiocyanate was used in the reaction with benzoic acid hydrazide and subsequent cyclization in sodium hydroxide medium. The solution was acidified with ethanoic acid to obtain the original thiol. The next stage was to synthesize alkyl derivatives. The reactions were carried out in the medium of propan-2-ol with the addition of an equivalent amount of the corresponding haloalkane. The synthesized alkyls are white crystalline compounds. The structure of the substances was established using UV and IR spectrophotometry, ¹H NMR spectrometry, elemental analysis and chromatography-mass spectrometry. Preliminary screening of biological properties was carried out using computer programs GUSAR Online® and PASS Online®.

Results and their discussion. 11 new compounds were obtained, the structure of which was confirmed using modern physicochemical methods of analysis.

Conclusions. The method of synthesis of alkyl derivatives 1-(3-mercapto-5-phenyl-4h-1,2,4-triazol-4-yl)-2-phenylethan-1-one was optimized. In the future, it is planned to carry out prescreening studies on the synthesized compounds.