



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.)

М78 **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 (6-(2,6-DICHLOROPHENYL)-3-(3-METHYL-
PYRAZOL-5-YL)-6,7-DIHYDRO-[1,2,4]TRIAZOLO[3,4-
B][1,3,4]THIADIAZIN-7-YL)(R)METHANONE**

Fedotov S. O., Gotsulia A. S.

Zaporizhia State Medical and Pharmaceutical University, Zaporizhia, Ukraine

serjioolegovich@gmail.com

Introduction. 1,2,4-triazole-based drugs such as voriconazole, forasartan, sitagliptin, and letrozole are already in use in the medical field. Available research results also confirm the significant potential of 1,2,4-triazole derivatives as promising sources for the creation of antibacterial, antiviral, antifungal, anti-inflammatory, antiproliferative, anticonvulsant, antioxidant, and antiparkinsonian drugs.

The pyrazole ring is also another example of a heteroaromatic framework that exhibits a wide range of biological activity. Known examples of successful use of pyrazole derivatives include celecoxib and deracoxib (cyclooxygenase-2 inhibitors), surinabant (a cannabinoid receptor type 1 antagonist) and crizotinib (an ALK inhibitor). Thus, the study of new compounds created with the participation of such heterocyclic structures is relevant.

Aim. Synthesis and investigation of properties of new (6-(2,6-dichlorophenyl)-3-(3-methyl-1*H*-pyrazol-5-yl)-6,7-dihydro-[1,2,4]triazolo[3,4-*b*][1,3,4]thiadiazin-7-yl)(R)methanone and study of their properties.

Materials and methods. Synthesis of new derivatives 6-(2,6-dichlorophenyl)-3-(3-methyl-1*H*-pyrazol-5-yl)-6,7-dihydro-[1,2,4]triazolo[3,4-*b*][1,3,4]thiadiazin-7-yl)(R)methanone was accomplished by a two-step transformation. At the first stage, the Schiff base was obtained as a result of the reaction of 4-amino-5-(3-methyl-1*H*-pyrazol-5-yl)-1,2,4-triazole-3-thiol with 2,6-dichlorobenzaldehyde. At the next stage, the obtained 4-((2,6-dichlorobenzylidene)amino)-5-(3-methyl-1*H*-pyrazol-5-yl)-1,2,4-triazole-3-thiol reacted with an equivalent amount of substituted aromatic ketones in the presence of a double excess of sodium hydride in tetrahydrofuran medium. The structure of the synthesized compounds was confirmed by a complex of physical and chemical methods of analysis. The biological potential of the synthesized substances was predicted using molecular docking and the SwissADME web application.

Results and their discussion. 10 new previously undescribed substances were synthesized. The structure of the compounds was proven using ¹H NMR spectroscopy, chromato-mass spectroscopy and elemental analysis. With the help of computer forecasting, a possible spectrum of biological activity was established, which includes antifungal and antiviral activity.

Conclusions. The obtained results were analyzed and benchmarks for further biological research were established.