

**Синтез та фізико-хімічні дослідження амідів ізопропілового естеру
2-((5-((теофілін-7'-іл)метил)-4-R-4H-1,2,4-тріазол-3-іл)тіо)ацетатної кислоти
Гоцуля А.С., Князевич П.С.**

*Кафедра токсикологічної та неорганічної хімії,
Запорізький державний медичний університет,
м. Запоріжжя, Україна
knyazevich@2ch.hk*

Серед синтетичних лікарських засобів важливе місце займають похідні амідів карбонових кислот. Вони є цікавим синтоном у синтезі ряду біологічно активних речовин, що теоретично можуть застосовуватися у медичній практиці, як засоби для лікування туберкульозу та вірусних інвазій. Тому одержання та дослідження властивостей амідів гетероциклічних структур, до складу яких входять фрагменти 1,2,4-тріазолу та теофіліну є практично значимим.

Ряд робіт вказує на те, що поєднання 1,2,4-тріазолу та інших гетероциклів в одній молекулі призводить до підвищення біологічної активності при невеликій токсичності отримуваних сполук.

Методика синтезу передбачає взаємодію естерів 2-((5-((теофілін-7'-іл)метил)-4-R-4H-1,2,4-тріазол-3-іл)тіо)ацетатної кислоти ($R = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_6\text{H}_5$), які було отримано за відомими методиками, з еквівалентною кількістю аміну (амоніак, діетаноламін, метиламін, моноетаноламін) у середовищі етанолу. Таким чином було отримано 12 сполук.

За фізичними властивостями отримані амідні речовини – білі кристалічні речовини, важкорозчинні у воді. Для аналізу сполуки очищені перекристалізацією із метанолу чи етанолу.

Структуру отриманих сполук підтверджено за допомогою сучасних фізико-хімічних методів аналізу: ^1H ЯМР-спектроскопії, ІЧ-спектроскопії, елементного аналізу та хромато-мас-спектрометрії. Проведено комп'ютерне прогнозування біологічної активності та гострої токсичності отриманих сполук за допомогою програм «PASS Online[®]» та «GUSAR Online[®]». Результати попереднього дослідження показали, що запропонований напрямок синтезу є актуальним.