

електростатичної будови сполук спостерігається з лігандами, співкристалізованими з розчинною епоксидгідролазою людини (PDB 3OTQ, 3PDC, 1ZD5). Проводився молекулярний докінг відібраних «кандидатів» за допомогою програми POSIT. Отже, зазначені гетероциклічні системи можуть розглядатися як ключові скафолди для дизайну нових «лікоподібних молекул» зазначеного виду активності.

СИНТЕЗ ТА ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ДЕЯКИХ ПОХІДНИХ 8-(((5-ТІО-4-R-1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ІЛ)МЕТИЛ)ТІО)КОФЕЇНУ

П. С. Князевич, А. С. Гоцуля, О. І. Панасенко, Є. Г. Книш

Запорізький державний медичний університет

knyazevich@2ch.hk

Пошук біологічно активних сполук серед похідних 1,2,4-тріазолу є актуальною задачею медицини і фармації. На базі даної гетероциклічної системи створено велику кількість препаратів, які добре зарекомендували себе у лікарській практиці. Також високо цінуються препарати, які містять у складі молекул діючої речовини ядро пурина. Похідні цієї системи прості у синтезі, мають виражену біологічну дію. Сполучення двох гетероциклічних ядер – 1,2,4-тріазолу та кофеїну у складі одної молекули теоретично може призвести до багаторазового підвищення біологічної активності синтетичних похідних.

Метою роботи був синтез ряду похідних 8-(((5-тіо-4-R-1,2,4-тріазол-3-іл)метил)тіо)кофеїну ($R = \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5$) та аналіз отриманих сполук з допомогою актуальних фізико-хімічних методів аналізу.

За відомими методиками отримано натрієву сіль вихідного тіолу та вивчено умови проходження реакції електрофільного заміщення з використанням ряду алкілюючих агентів (2-хлоретан-1-ол, бромацетон, 2-бromo-1-фенілетан-1-он, 2-бromo-1-(4-метоксифеніл)етан-1-он, монохлорацетатна кислота, амід монохлорацетатної кислоти). Усі реакції проводили у водно-спиртовому середовищі при нагріванні. Отримані продукти це білі або світло-жовті кристалічні речовини. Для верифікації структури отриманих сполук визначали температури плавлення, проводили аналіз за допомогою спектрометричних та хроматографічних методів.

Висновки. Отримано 10 раніше неописаних сполук. Структуру отриманих сполук підтверджено спектрометричними та хроматографічними методами аналізу. Розглянуто подальші перспективи дослідження отриманих сполук, а саме: дослідження гострої токсичності та біологічної активності *in vivo*.