СИНТЕЗ И ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 5-АМИНОЗАМЕЩЕННЫХ 3-БРОМ-4-НИТРО-1-(1,1- ДИОКСОТИЕТАНИЛ-3)ПИРАЗОЛОВ

С.О. Шепилова, Е.Э. Клен

Кафедра фармацевтической химии, Башкирский государственный медицинский университет, 450008, Россия, Уфа, ул.Ленина, 3.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-484

e-mail: svetikshepilova@mail.ru

Одной из приоритетных задач фармацевтической химии на сегодняшний день остается синтез новых биологически активных веществ. Перспективными являются производные пиразола, которые широко применяются как противовоспалительные (Celecoxib), противоопухолевые (Crizotinib), антикоагулянты (Apixaban), гипогликемические (Teneligliptin) и анксиолитические (Mepiprazole) средства.

В продолжение исследований по синтезу производных 1-(тиетанил-3)пиразола [1] нами исследованы реакции 3,5-дибром-4-нитро-1-(1,1-диоксотиетан-3)пиразола (**2**) с аминами. Исходный пиразол **2** получен окислением 3,5-дибром-4-нитро-1-(тиетанил-3)пиразола (**1**) пероксидом водорода. Установлено, что реакции пиразола **2** с первичными и вторичными аминами гладко протекают при кипячении в этаноле. 5-Аминозамещенные 3-бром-4-нитро-1-(1,1-диоксотиетан-3)пиразолы (**3-6**) образуются с выходом до 80%.

Структура синтезированных соединений подтверждена данными ИК-, ЯМР 1H и ^{13}C спектров. Результаты прогноза биологической активности в программе PASS online показали, что 5-аминопроизводные **3-6** с вероятностью более 0,7 могут быть использованы для лечения эндометриоза и других гинекологических заболеваний.

Литература

- [1]. F. A. Khaliullin, E. E. Klen, N. N. Makarova [et al.], Chemistry of Heterocyclic Compounds. 2020, 56, 1213-1217.