



# ДИЗАЙН, СИНТЕЗ, ИССЛЕДОВАНИЯ *in silico* И ПРОТИВОМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ РЯДА ТИАДАЗИНОВ И 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-ТИОНОВ, НЕСУЩИХ ПИРАЗОЛОВУЮ ГРУППУ<sup>1</sup>

© 2020 Soukhyarani Gopal Nayak\* and Boja Poojary\*. #

\*Department of Chemistry, Mangalore University, Mangalagangothri, Mangaluru, Karnataka, 574199 India

Поступила в редакцию 14.05.2019 г.

После доработки 14.06.2019 г.

Принята к публикации 16.09.2019 г.

В виду активной разработки новых биологически активных соединений получена серия 6-(замещенных фенил)-3-(5-метил-1-фенил-1*H*-пиразол-4-ил)-7*H*-[1,2,4]триазоло[3,4-*b*][1,3,4]тиадиазинов и 4-[(замещенных бензилиден)амино]-5-(5-метил-1-фенил-1*H*-пиразол-4-ил)-2,4-дигидро-3*H*-1,2,4-триазол-3-тионов с хорошими выходами. Структуры соединений подтверждены элементным анализом, методами масс спектрометрии, Фурье-ИК, <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C ЯМР спектрометрии. Для изучения взаимодействий полученных производных с рецептором был произведен докинг с простагландин D2-синтазой (PDGS). Позиции докинга и нековалентные взаимодействия позволили понять возможный механизм ингибирования. Они показали высокую антибактериальную активность против штаммов *Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Escherichia coli* и *Pseudomonas aeruginosa*. В частности, хлор-, фтор-, диметокси- и дигидрокси-производные показали высокую активность.

*Ключевые слова:* тиадиазин, основания Шиффа, молекулярный докинг, простагландин D2-синтаза, антибактериальная активность

DOI: 10.1134/S0132342320010078

<sup>1</sup> Полный текст статьи печатается в английской версии журнала.

# Автор для связи: (тел.: +91-944-886-5403; эл. почта: poojaryboja@gmail.com).