

**Химия**

**Научная статья**

УДК 547.794

**СИНТЕЗ И СВОЙСТВА БИС(5-АМИНО-1,3,4-ТИАДИАЗОЛ-2-ИЛ)ПРОПАНА  
И ЕГО АЦИЛИРОВАННОГО АНАЛОГА**

Юлия Валентиновна Суворова\*, Екатерина Александровна Петухова,  
Елена Адольфовна Данилова, Дмитрий Васильевич Тюрин

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

---

**ИНФОРМАЦИЯ**

**История статьи:**

Поступила 27.10.2021

Одобрена 15.11.2021

Принята 20.11.2021

---

**Ключевые слова:**

бис(5-амино-1,3,4-тиади-  
азол-2-ил)пропан,  
двухъядерные диамины,  
синтез,  
ацилирование

---

**АННОТАЦИЯ**

Статья посвящена прогнозированию биологических (в том числе антибактериальных) и цитотоксических свойств, а также синтезу двухъядерного гетероциклического амина – бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана и его ацилированного аналога – бис(5-амино-(5'-N-ацетил-амино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана. Строение полученных соединений подтверждено данными ИК-, электронной, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и рентгеноспектрального микроанализа. Показана возможность синтезированных продуктов проявлять жидкокристаллические свойства.

---

**DOI:**

10.18083/LCAppl.2022.1.6

---

**Для цитирования:**

Суворова Ю. В., Петухова Е. А., Данилова Е. А., Тюрин Д. В. Синтез и свойства бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана и его ацилированного аналога // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2022. Т. 22, № 1. С. 6–15.

---

\*Автор для переписки: [butina@isuct.ru](mailto:butina@isuct.ru)

© Суворова Ю. В., Петухова Е. А., Данилова Е. А., Тюрин Д. В., 2022

*Chemistry*

*Research Article*

**SYNTHESIS AND PROPERTIES OF BIS(5-AMINO-1,3,4-THIADIAZOLE-2-YL)PROPANE  
AND ITS ACYLATED DERIVATIVE**

Yuliya V. Suvorova\*, Ekaterina A. Petukhova, Elena A. Danilova, Dmitry V. Tyurin

*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russia*

---

**ARTICLE INFO:**

**ABSTRACT**

**Article history:**

Received 27 October 2021,  
Approved 15 November 2021,  
Accepted 20 November 2021

---

**Key words:**

bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-  
2-yl)propane,  
binuclear diamines,  
synthesis,  
acylation

This article is devoted to prediction of biological (including antibacterial) and cytotoxic properties and synthesis of binuclear heterocyclic amine – bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane and its acylated derivative – bis(5-amino-(5'-N-acetylamino)-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane. The structures of obtained compounds were confirmed by data of IR, UV-Vis, NMR spectroscopy, mass-spectrometry and X-ray spectral microanalysis. The possibility to exhibit liquid crystal properties by the synthesized products was shown.

---

**DOI:**

**10.18083/LCAppl.2022.1.6**

---

**For citation:**

Suvorova Yu. V., Petukhova E. A., Danilova E. A., Tyurin D. V. Synthesis and properties of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane and its acylated derivative. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2022, **22** (1), 6–15 (in Russ.).

---

\*Corresponding author: butina@isuct.ru

© Suvorova Yu.V., Petukhova E.A., Danilova E.A., Tyurin D.V., 2022

## Введение

Разработка новых лекарственных средств – сложный, трудоемкий и времязатратный процесс, не всегда приводящий к успешному результату. Для направленного поиска веществ, обладающих заданными свойствами, в настоящее время активно используются подходы хемо- и биоинформатики, которые позволяют при совместном использовании информационных ресурсов, вычислительной математики и математической статистики выполнять прогнозирование свойств по химической структуре, поиск по молекулярному подобию и виртуальный скрининг [1–3]. Применение подобных ресурсов дает возможность заранее исключить «неактивные» структуры.

Очень важную роль для целенаправленного синтеза лекарственного вещества играет присутствие в химической структуре фармакофора – фрагмента, несущего определенную фармакологическую активность. Один из «ярких» фармакофоров – 1,3,4-тиадиазольный остаток – наиболее интересен для химической модификации, так как входит в состав известных препаратов, обладающих антибактериальным (этазол) и противопаразитарным (мегасол) действиями, применяющихся для лечения неврологических заболеваний (тизанидин), являющихся диуретиками (диакарб, метазоламид) [4, 5].

Кроме того, как показывают литературные данные [6], гетероциклические азотсодержащие соединения проявляют жидкокристаллические свойства и, следовательно, могут быть использованы для выявления структурных неоднородностей в биологических тканях. Известно, что жидкие кристаллы полностью поглощают поляризованный свет, показывая изотропию опухолевых тканей. При этом поглощения здоровыми анизотропными тканями не происходит, что позволяет увидеть резкую границу между нормальными и злокачественными тканями [7]. Поэтому проявление жидкокристаллических свойств дает возможность использования соединений в медицине для лечения онкологических заболеваний [8, 9].

В связи с этим бистиадиазоламины – двухъядерные гетероциклические соединения, содержащие два 1,3,4-тиадиазольных фрагмента, связанных различными спейсерами, являются перспективными объектами для исследования биологических свойств *in silico* и последующего синтеза. Ра-

нее нами были спрогнозированы свойства и подобрана оптимальная методика получения бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)этана и –бутана [10]. В качестве объектов исследования в данной работе выбраны бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропан и его ацилированный аналог – бис(5-амино-(5'-*N*-ацетиламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропан.

## Эксперимент

Тиосемикарбазид (Вектон, «Ч») перекристаллизовывали из воды с активированным углем ( $T_{пл} = 180\text{ }^{\circ}\text{C}$ ). Глутаровую кислоту (Вектон, «ИМП») использовали как коммерческий продукт без дальнейшей очистки.

Исследования синтезированных соединений были в основном проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ.

ИК-спектры получены на спектрометре *AVATAR 360 FT-IR* с приставкой диффузионного отражения *Tensor 27 Bruker Optics*. Образцы готовили тщательным растиранием синтезированных соединений с KBr и дальнейшим прессованием таблетки. Электронные спектры поглощения (ЭСП) регистрировали в УФ-области на спектрофотометре *HITACHI U-2001* в кварцевых кюветах толщиной 1 и 2 мм. Для получения физики поверхности исследуемых образцов использовали сканирующий электронный микроскоп *Vega 3 SBH. MALDI-TOF* масс-спектры записывали на приборе *AXIMA Confidence (SHIMADZU)* в режиме положительных ионов. Образцы готовили растворением синтезированных соединений в ДМФА ( $c = 10^{-4}$ – $10^{-6}$  моль·л<sup>-1</sup>). В качестве матрицы использовали DHB – 2,5-дигидроксibenзойную кислоту.

Спектры ядерного магнитного резонанса (ЯМР) зарегистрированы на спектрометре *Bruker Avance III 500* с рабочими частотами 500,17 (<sup>1</sup>H ЯМР) и 125,77 (<sup>13</sup>C ЯМР) МГц. Для отнесения сигналов полученных соединений был зарегистрирован спектр <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C HSQC. Образцы готовили растворением исследуемых соединений в ДМСО-*d*<sub>6</sub>.

Прогнозирование спектров биологической (в том числе, антибактериальной) активностей и цитотоксичности выполняли при помощи программ: *PASS (Prediction of Activity Spectra for Substances)*, *Anti-Bac-Pred* и *CLC-Pred* [11, 12], находящихся в свободном доступе в сети Интернет.

#### Синтез бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (**1**)

Смесь, состоящую из 0,77 г (8,4 ммоль) тиосемикарбазида и 0,55 г (4,2 ммоль) глутаровой кислоты, предварительно тщательно растертых, растворяли в 10 мл оксихлорида фосфора. Температуру ступенчато поднимали до 60 °С в течение 30 мин, выдерживали при этой температуре 20–25 мин. Затем реакционную массу выливали на лед и вымораживали примеси, которые затем отфильтровывали. Продукт выделяли из фильтрата добавлением 40 %-го раствора NaOH до pH = 7. Выпавший осадок отфильтровывали, промывали ледяной водой для удаления неорганических примесей, а затем органическими растворителями и сушили. Целевой продукт получали в виде порошка белого цвета с выходом 0,84 г (82,5 %).  $T_{пл} = 268–270$  °С. ИК-спектр (KBr),  $\nu/\text{см}^{-1}$ : 3276 (N–H<sub>вал</sub><sup>асимм</sup>), 3097 (N–H<sub>вал</sub><sup>симм</sup>), 2860 (CH<sub>2</sub>–CH<sub>2вал</sub>), 1622 (N–H<sub>деф</sub>), 1521 (C=N<sub>вал</sub>), 1398 (CH<sub>2</sub>–CH<sub>2деф</sub>), 1204, 1055, 694, 653, 583, 430. MALDI-TOF MS (DHB),  $m/z$  (%): 243,48 (100)  $[M+H]^+$ , 265,50 (54)  $[M+Na]^+$ . (Рассчитано на C<sub>7</sub>H<sub>10</sub>N<sub>6</sub>S<sub>2</sub> EM 242,04). <sup>1</sup>H ЯМР (500,17 МГц, ДМСО-*d*<sub>6</sub>),  $\delta/\text{м.д.}$ : 7,04 (с., 4H, –NH<sub>2</sub>), 2,87–2,84 (т., 4H, –CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–), 2,00–1,94 (м., 2H, –CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–). <sup>13</sup>C ЯМР (125,77 МГц, ДМСО-*d*<sub>6</sub>),  $\delta/\text{м.д.}$ : 173,93; 168,77; 29,05; 28,93.

#### Синтез бис(5-амино(5'-N-ацетиламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (**2**)

В 12 мл (8,4 ммоль) 97 %-го уксусного ангидрида при перемешивании растворяли 0,1 г (8,4 ммоль) бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана. Реакционную массу нагревали до 85–90 °С и выдерживали при этой температуре 4–4,5 ч. После завершения выдержки температуру понижали до 65–70 °С, затем прибавляли 7 мл ледяной уксусной кислоты. Перемешивание продолжали в течение часа при комнатной температуре. Выпавший осадок отфильтровывали, промывали водой для удаления неорганических примесей, а затем органическими растворителями и сушили. Целевой продукт получали в виде порошка белого цвета с выходом 0,02 г (17,17 %).  $T_{пл} = 258–260$  °С. ИК-спектр (KBr),  $\nu/\text{см}^{-1}$ : 3278 (N–H<sub>вал</sub><sup>асимм</sup>), 3171 (N–H<sub>вал</sub><sup>симм</sup>), 2796 (CH<sub>2</sub>–CH<sub>2вал</sub>), 1693 (C=O<sub>вал</sub>), 1640 (N–H<sub>деф</sub>), 1574 (C=N<sub>вал</sub>), 1447 (CH<sub>3деф</sub>), 1371 (CH<sub>2</sub>–CH<sub>2деф</sub>), 1319, 1243, 1156, 1005, 964, 825, 657. MALDI-TOF MS (DHB),  $m/z$  (%): 284,55 (80)  $[M]^+$ , 385,69 (100)  $[M+2K+Na]^+$ . (Рассчитано на C<sub>9</sub>H<sub>12</sub>N<sub>6</sub>OS<sub>2</sub> EM 284,05). <sup>1</sup>H ЯМР (500,17 МГц, ДМСО-*d*<sub>6</sub>),  $\delta/\text{м.д.}$ :

5,76 (с., 2H, –NH<sub>2</sub>), 5,01 (с., H, –NH), 3,07–3,04 (т., 4H, –CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–), 2,65–2,63 (м., 2H, –CH<sub>2</sub>–CH<sub>2</sub>–), 1,90 (с., 3H, –CH<sub>3</sub>).

#### Результаты и их обсуждение

На первом этапе работы для оценки целесообразности синтеза бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (**1**) и его ацилированного производного – бис(5-амино(5'-N-ацетиламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (**2**) были применены подходы хемо- и биоинформатики. Так, прогноз спектра биологической активности, выполненный с использованием специализированного *online* ресурса PASS [11], показал, что соединение **1** может проявлять антидиабетические свойства с вероятностью 72 %, являться потенциальным ингибитором важнейших ферментов, участвующих в обменных процессах организма: НАДФ<sup>+</sup>-зависимой дегидрогеназы, АТФ-азы и мурамоилтетрапептид карбоксипептидазы (с вероятностью 66–69 %). По результатам прогноза введение ацетильной группы не оказывает существенного влияния на изменение биологической активности молекулы **2** по сравнению с **1**. Однако известно о значительном влиянии ацилирования на фармакологическую активность, так как подобный субстрат является источником активированных ацетильных групп и с высокой вероятностью будет способен запустить митохондриальные процессы образования энергии.

Анализ спектра антибактериальной активности, выполненного посредством ресурса *Anti-Bac-Pred* [12], позволил сделать вывод, что соединение **1** может проявлять антибактериальную активность по отношению к штамму *Shigella sp.* с вероятностью 54,3 %. Наличие ацетильной группы в соединении **2** понижает вероятность проявления антибактериальных свойств по отношению к данному штамму, что является вполне логичным, так как происходит защита аминокислотной группы, которая взаимодействует с якорным участком активного центра фермента микроорганизма, тем самым предотвращая его размножение.

Результаты прогноза цитотоксичности показали, что молекула **1** может проявлять цитотоксичность по отношению к фибросаркоме мягких тканей, соединение **2** – к аденокарциноме легких и яичников с вероятностью 35,5 %, 37,1 % и 31,6 %, соответственно.

Однако возможность гибели здоровых клеток почек во всех случаях составляет 54–57 %, что подтверждает известный факт о достаточно тяжелом побочном действии противоопухолевых препаратов.

Синтез бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана проводили взаимодействием эквимольных количеств тиосемикарбазида с глутаровой кислотой в среде оксихлорида фосфора (схема 1).

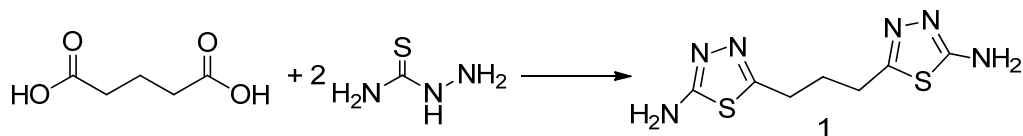


Схема 1. Синтез бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана

Scheme 1. The synthesis of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane

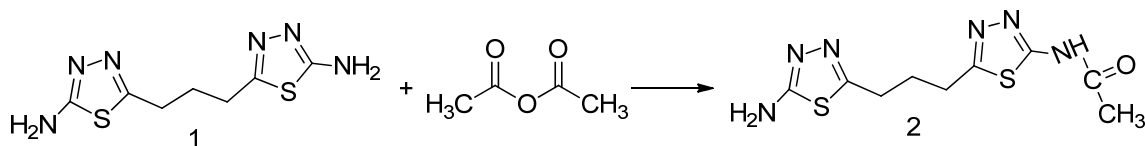


Схема 2. Синтез бис(5-амино-(5'-N-ацетиламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана

Scheme 2. The synthesis of bis(5-amino-(5'-N-acetylamino)-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane

В электронных спектрах соединений **1** и **2** отсутствует ярко выраженная полоса поглощения, наблюдается лишь плечо в области 280 нм, так как в молекулах отсутствует протяженная цепочка сопряжения.

ИК-спектры полученных соединений являются подобными и содержат полосы в областях 3276–3278, 3097–3171 и 1622–1640 см<sup>-1</sup>, соответствующие асимметричному, симметричному валентным и деформационным колебаниям N–H связей свободных аминогрупп, соответственно. Полосы при 2860, 2796 и 1398, 1371 см<sup>-1</sup> характеризуют, соответственно, валентные и деформационные колебания алкильного спейсера, при 1521 и 1574 см<sup>-1</sup> – валентные колебания связи C=N гетероциклического фрагмента. Однако в спектре соединения **2** наблюдается полоса валентных колебаний карбонильной группы (1693 см<sup>-1</sup>), что подтверждает вступление ацильного фрагмента.

В масс-спектре соединения **1**, представленного на рис. 1, присутствуют сигналы с  $m/z$  243,48

Ацилированием **1** уксусным ангидридом синтезировали бис(5-амино-(5'-N-ацетиламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропан (схема 2).

Строение полученных соединений установлено на основании данных ИК-, электронной, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и рентгеноспектрального микроанализа.

и 265,50 Да, отвечающие целевым молекулярным ионам в формах  $[M+H]^+$  и  $[M+Na]^+$ , соответственно. Масс-спектр молекулы **2** (рис. 2) содержит два сигнала: целевого молекулярного иона  $[M]^+$  ( $m/z$  284,55 Да) и иона в форме  $[M+2K+Na]^+$  ( $m/z$  385,69 Да). Изотопные распределения соответствуют теоретически рассчитанным.

Для синтезированных соединений были зарегистрированы <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C ЯМР спектры. Для отнесения сигналов был выполнен двумерный спектр <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C HSQC.

На рисунке 3 представлен <sup>1</sup>H ЯМР спектр бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (**1**). Триплет в области 2,87–2,84 м.д. и мультиплет в области 2,00–1,94 м.д. характеризуют резонанс протонов алкильного спейсера. Сигнал протонов аминогруппы наблюдается в виде синглета в области 7,04 м.д. Интегральные интенсивности сигналов подтверждают сделанные отнесения.

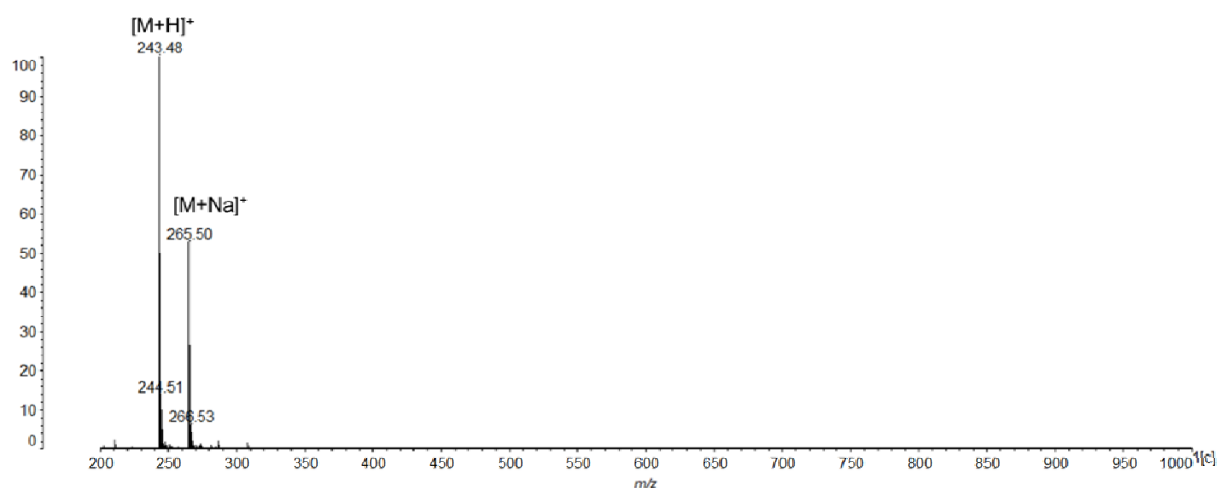


Рис. 1. Фрагмент масс-спектра бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (1)

Fig. 1. The fragment of mass-spectrum of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane (1)

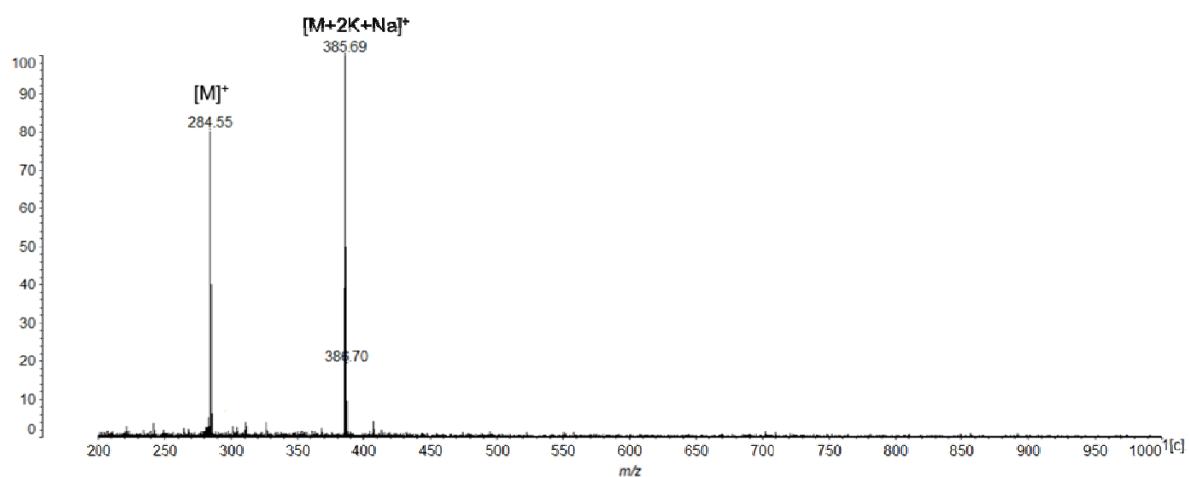


Рис. 2. Фрагмент масс-спектра бис(5-амино-(5'-N-ацетиламино)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (2)

Fig. 2. The fragment of mass-spectrum of bis(5-amino-(5'-N-acetylamino)-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane (2)

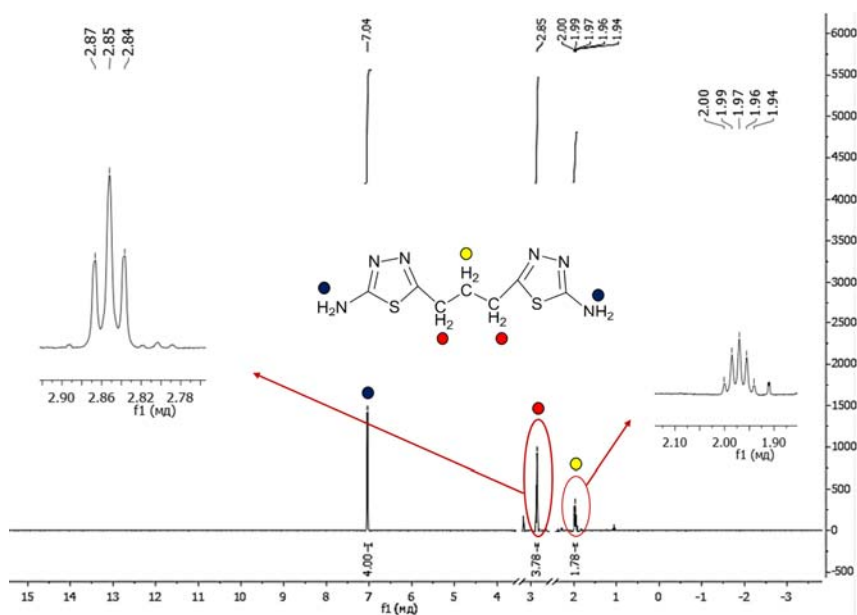


Рис. 3.  $^1\text{H}$  ЯМР спектр бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (1)

Fig. 3.  $^1\text{H}$  NMR spectrum of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane (1)

Гетероядерный корреляционный эксперимент HSQC, в спектре которого имеются кросс-пики между протонами и ядрами углерода, напрямую связанными друг с другом, позволил соотнести сигналы в спектрах обоих ядер (рис. 4). По оси абсцисс расположен  $^1\text{H}$  ЯМР, а по оси ординат –  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектр. На рисунке 4 присутствуют два

кросс-пики, которые отвечают корреляциям протонов с химическими сдвигами 2,84, 1,96 м.д. и атомов углерода – 28,65 м.д., соответственно. Наличие кросс-пигов позволяет утверждать, что между атомами  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  с названными химическими сдвигами существует химическая связь.

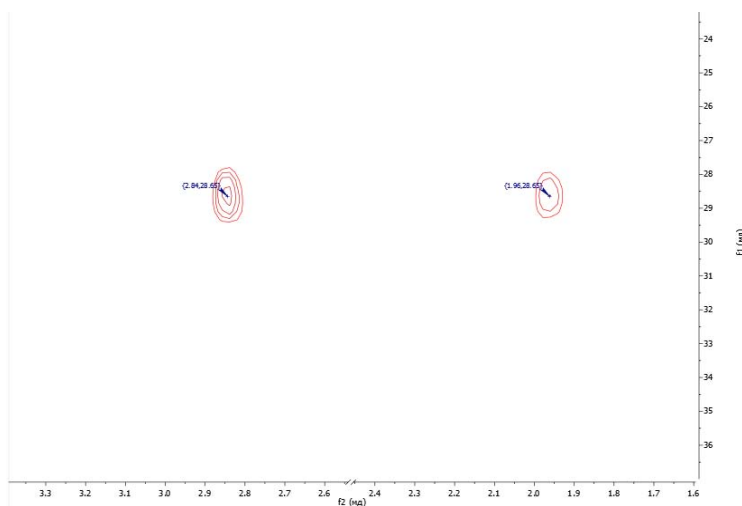


Рис. 4. Соответствующие пары кросс-пигов двумерного HSQC ЯМР спектра бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (1) в увеличенном масштабе в виде контурных карт

Fig. 4. Corresponding pairs of cross-peaks of the two-dimensional HSQC NMR spectrum of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazol-2-yl)propane (1) on an enlarged scale in the form of contour maps

По данным рентгеноспектрального микроанализа, совмещенного со сканирующим электронным микроскопом – СЭМ (для полуколичественной оценки концентрации химических элементов в исследуемых соединениях), было опреде-

лено, что в состав бистиадиазолпропана входят углерод, азот и сера, как показано на рис. 5. Рельефная поверхность исследуемого порошка бистиадиазолпропана представлена на рис. 6.

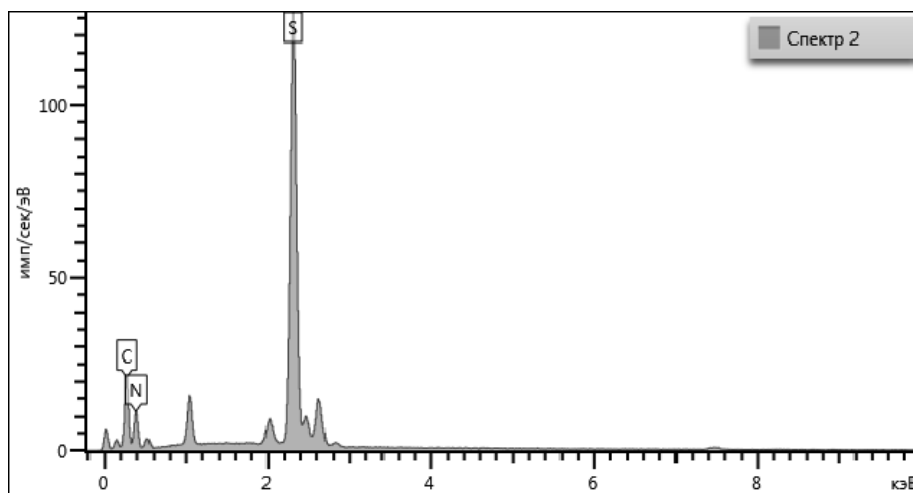


Рис. 5. Состав бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (1)

Fig. 5. The composition of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane (1)

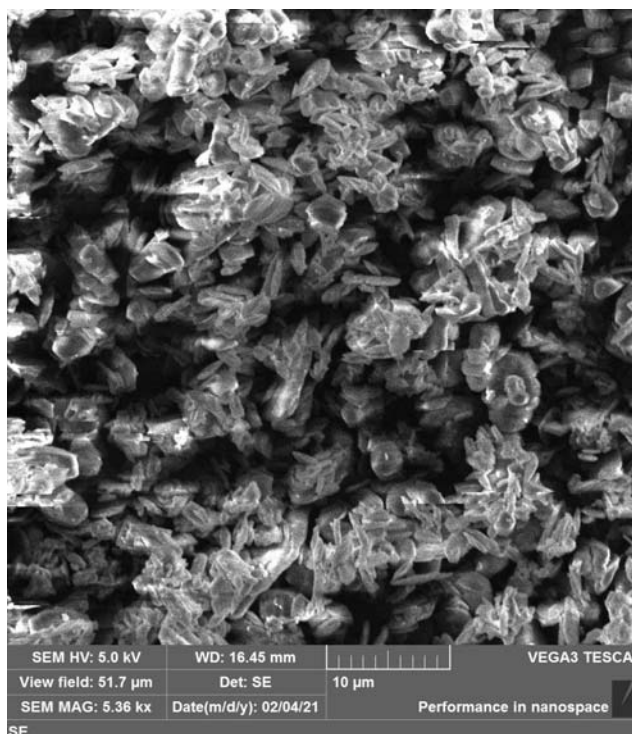


Рис. 6. Рельефная поверхность бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)пропана (1)

Fig. 6. The relief surface of bis(5-amino-1,3,4-thiadiazole-2-yl)propane (1)



### Выводы

Таким образом, в среде уксусного ангидрида в мольном соотношении 1:1 при температуре 90 °С нам удалось провести только моноацилирование бистиадiazолпропана. Методами ИК-, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии установлено строение полученных соединений.

**Благодарности:** Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-1396.2020.3. Исследования синтезированных соединений проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

**Acknowledgments:** The work was supported by the RF President's Grant MK-1396.2020.3. The study of the synthesized compounds was carried out using the resources of the Center for Shared Use of Scientific Equipment of the ISUCT (with the support of the Ministry of Science and Higher Education of Russia, grant No. 075-15-2021-671).

### Список источников / References

1. Погребняк А. В. Изучение новых свойств известных лекарственных препаратов. Сообщение I. Теоретическое обоснование, получение и исследование новых дезагрегантов на основе известных лекарственных препаратов // *Фармация и фармакология*. 2013. № 1. С. 8–17. [Pogrebnyak A.V. Study of new properties of known drugs. Communication I. Theoretical substantiation, obtaining and research of new anti-aggregants based on known drugs. *Pharmacy and Pharmacology*, 2013, (1), 8–17. (in Russ.).]
2. Сулимов А. В., Кутов Д. К., Тащилова А. С., Ильин И. С., Подоплелова Н. А., Пантелеев М. А., Леденева И. В., Шихалиев Х. С., Сулимов В. Б. Современные методы разработки новых лекарственных средств, влияющих на систему гемостаза // *Вопросы гематологии/онкологии и иммунопатологии в педиатрии*. 2019. Т. 18, № 4. С. 136–152. [Sulimov A.V., Kutov D.C., Tashchilova A.S., Il'in I.S., Podoplelova N.A., Panteleev M.A., Ledeneva I.V., Shikhaliev Kh.S., Sulimov V.B. Modern methods for the development of new drugs that affect the hemostatic system. *Pediatric Hematology/Oncology and Immunopathology*, 2019, **18** (4), 136–152. (in Russ.).]  
**DOI:** 10.24287/1726-1708-2019-18-4-136-152].
3. Бутина Ю. В., Кудаярова Т. В., Данилова Е. А., Исляйкин М. К. Прогнозирование спектра биологической активности и антимикробные свойства диаминоазолов // *Биомедицинская химия*. 2019. Т. 65, вып. 2. С. 99–102. [Butina Yu.V., Kudayarova T.V., Danilova E.A., Islyaykin M.K. The prediction of the spectrum of biological activity and antimicrobial properties of diaminoazoles. *Biomed. Chem.*, 2019, **65** (2), 99–102 (in Russ.).]  
**DOI:** 10.18097/PBMC20196502099].
4. Данилова Е. А., Меленчук Т. В., Трухина О. Н., Исляйкин М. К. Диаминотиадiazолы – исходные соединения для макрогетероциклов // *Макрогетероциклы*. 2010. Т. 3, вып. 1. С. 68–81. [Danilova E.A., Melenchuk T.V., Trukhina O.N., Islyaykin M.K. Diaminothiadiazoles – building blocks for macroheterocycles. *Macroheterocycles*, 2010, **3** (1), 68–81 (in Russ.).]  
**DOI:** 10.6060/mhc2010.1.68].
5. Jain A.K., Sharma S., Vaidya A., Ravichandran V., Agrawal R.K. 1,3,4-Thiadiazole and its derivatives: A review on recent progress in biological activities. *Chem. Biol. Drug Des.*, 2013, **81** (5), 557–576.  
**DOI:** 10.1111/cbdd.12125.
6. Данилова Е. А., Иволин А. А., Воронцова А. А., Исляйкин М. К., Ананьева Г. А., Жарникова Н. В., Быкова В. В., Усольцева Н. В. Синтез и мезоморфные свойства 1-алкил-3,5-диамино-1,2,4-триазолов // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2011. Вып. 3. С. 5–14. [Danilova E.A., Ivolin A.A., Vorontsova A.A., Islyaykin M.K., Ananyeva G. A., Zharnikova N.V., Bykova V.V., Usol'tseva N.V. Synthesis and mesomorphic properties of 1-alkyl-3,5-diamino-1,2,4-triazoles. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2011, (3), 5–14 (in Russ.).]
7. Симоненко Г. В., Лакодина Н. А., Тучин В. В. Измерение оптической анизотропии биотканей с помощью ячейки с нематическим жидким кристаллом // *Оптический журнал*. 2000. Т. 67, № 6. С. 70–73. [Simonenko G.V., Lakodina N.A., Tuchin V.V. Measurement of optical anisotropy of biological tissues using a cell with a nematic liquid crystal. *Optical Journal*, 2000, **67** (6), 70–73 (in Russ.).]
8. Koifman O.I., Ageeva T.A., Beletskaya I.P., Averin A.D., Yakushev A.A., Tomilova L.G., Dubinina T.V., Tsivadze A.Yu., Gorbunova Yu.G., Martynov A.G., Konarev D.V., Khasanov S.S., Lyubovskaya R.N., Lomova T.N., Korolev V.V., Zenkevich E.I., Blaudeck T., von Borczyskowski Ch., Zahn D.R.T., Mironov A.F., Bragina N.A., Ezhov A.V., Zhdanova K.A., Stuzhin P.A., Pakhomov G.L., Rusakova N.V., Semenishyn N.N., Smola S.S., Parfenyuk V.I., Vashurin A.S., Makarov S.V., Dereven'kov I.A., Mamardashvili N.Zh., Kurtikyan T.S., Martirosyan G.G., Burmistrov V.A., Aleksandriiskii V.V., Novikov I.V., Pritmov D.A., Grin M.A., Suvorov N.V., Tsigankov A.A., Fedorov A.Yu., Kuzmina N.S., Nyuchev A.V., Otvaigin V.F., Kustov A.V., Belykh D.V., Berezin D.B., Solovieva A.B., Timashev P.S., Milaeva E.R., Gracheva Yu.A., Dodokhova M.A., Safronenko A.V.,

- Shpakovsky D.B., Syrбу S.A., Gubarev Yu.A., Kiselev A. N., Koifman M.O., Lebedeva N.Sh., Yurina E.S. Macroheterocyclic compounds – a key building block in new functional materials and molecular devices. *Macroheterocycles*, 2020, **13** (4), 311–467. DOI: 10.6060/mhc200814k.
9. Раскильдина Г. З., Сахабутдинова Г. Н., Злотский С. С., Султанова Р. М., Мещерякова С. А., Шумадалова А. В., Борцова Ю. Л., Кузьмина У. Ш. Антиоксидантная и цитотоксическая активность ряда О- и S-содержащих макроциклов // *Изв. вузов. Хим. и хим. техн.* 2020. Т. 63, № 3. С. 82–87. [Raskil'dina G.Z., Sakhabutdinova G. N., Zlotsky S.S., Sultanova R.M., Meshcheryakova S.A., Shumadalova A.V., Bortsova Y.L., Kuzmina U.S. Antioxidant and cytotoxic activity of a series of O- and S-containing macrocycles. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.*, 2020, **63** (3), 82–87 (in Russ.). DOI: 10.6060/ivkkt.20206303.6118].
10. Суворова Ю. В., Петухова Е. А., Данилова Е. А., Тюрин Д. В. Синтез и свойства бистиадиазолов с этильным и бутильным спейсерами // *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2020. Т. 20, № 4. С. 27–34. [Suvorova Yu.V., Petukhova E.A., Danilova E.A., Tyurin D.V. Synthesis and properties of bistiadiazoles with ethyl and butyl spacers. *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2020, **20** (4), 27–34 (in Russ.). DOI: 10.18083/LCAppl.2020.4.27].
11. Филимонов Д. А., Дружиловский Д. С., Лагунин А. А., Глоризова Т. А., Рудик А. В., Дмитриев А. В., Погodin П. В., Пороиков В. В. Компьютерное прогнозирование спектров биологической активности химических соединений: возможности и ограничения // *Biomed. Chem.: Res. and Methods*. 2018. Т. 1, № 1. С. 1–21. [Filimonov D.A., Druzhilovskiy D.S., Lagunin A.A., Glorizova T.A., Rudik A.V., Dmitriev A.V., Pogodin P.V., Poroikov V.V. Computer-aided prediction of biological activity spectra for chemical compounds: opportunities and limitations. *Biomed. Chem.: Res. and Methods*, 2018, **1** (1), 1–21. (in Russ.). DOI: 10.18097/BMCRM00004].
12. Компьютерная программа *Anti-Bac-Pred*. <http://way2drug.com/antibac/>.
- Вклад авторов:**  
<sup>1</sup>Суворова Ю. В. – выполнение прогноза спектров биологической активности, анализ результатов и подготовка публикации.  
<sup>2</sup>Петухова Е. А. – синтез соединений.  
<sup>3</sup>Данилова Е. А. – выполнение прогноза спектров биологической активности, анализ результатов и подготовка публикации.  
<sup>4</sup>Тюрин Д. В. – выполнение масс-спектрального анализа.
- Contribution of the authors:**  
<sup>1</sup>Suvorova Yu.V. – prediction of biological activity spectra, analysis of results and preparation of a publication.  
<sup>2</sup>Petukhova E.A. – synthesis of compounds.  
<sup>3</sup>Danilova E.A. – prediction of biological activity spectra, analysis of results and preparation of a publication.  
<sup>4</sup>Tyurin D.V. – performing mass-spectrometry.
- Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.**  
**The authors declare no conflicts of interests.**
- <sup>1</sup><https://orcid.org/0000-0002-2994-8044>  
<sup>2</sup><https://orcid.org/0000-0002-0776-4041>  
<sup>3</sup><https://orcid.org/0000-0001-6765-6707>  
<sup>4</sup><https://orcid.org/0000-0003-3544-8297>
- Поступила 27.10.2021, одобрена 15.11.2021, принята 20.11.2021  
Received 27.10.2021, approved 15.11.2021, accepted 20.11.2021