

OH P 12

Нови деривати 1,3,4-тиадиазола изведени из протокатехуинске киселине: Синтеза, антиоксидативна активност, теоријска и електрохемијска студија

Виолета Р. Марковић, Милан Д. Јоксовић, Катарина В. Јаковљевић, Љиљана С. Јовановић*, Едина Авдовић, Зоран Марковић**, Владимир Михаиловић
Природно-математички факултет, Институт за хемију, Универзитет у Крагујевцу, Р. Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија,
 * *Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Трг Д. Обрадовића 3, 21000 Нови Сад, Србија,*
 ** *Департман за хемијско-технолошке науке, Државни универзитет у Новом Пазару, Вука Караџића бб, 36300 Нови Пазар, Србија*

Извршена је синтеза и структурна карактеризација петнаест нових амидних деривата 1,3,4-тиадиазола изведених из протокатехуинске киселине. Такође, синтетизовани су одговарајући имино и аминокатехуински аналози фенил-супституисаног амидног деривата 1,3,4-тиадиазола ради поређења ефеката структурних промена на способност везивања радикала. Испитан је антиоксидативни потенцијал добијених једињења помоћу DPPH и ABTS тестова, као и коришћењем теорије функционалне густине (DFT) и цикличне волтамерије. Тестирана једињења су показала значајну антиоксидативну активност у поређењу са референтним антиоксидантима аскорбинском киселином и нордихидрогвајаретинском киселином (NDGA). На основу израчунатих термодинамичких параметара и електрохемијских експеримената изведени су закључци о највероватнијем механизму по ком се одвија антиоксидативна активност ових једињења.

Novel 1,3,4-thiadiazole conjugates derived from protocatechuic acid: Synthesis, antioxidant activity, computational study and electrochemistry

Violeta R. Marković, Milan D. Joksović, Katarina V. Jakovljević, Ljiljana S. Jovanović*, Edina Avdović, Zoran Marković**, Vladimir Mihailović
Faculty of Science, Department of Chemistry, University of Kragujevac, R. Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia,
 **Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg D. Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia,*
 ***Department of Chemical-Technological Sciences, State University of Novi Pazar, Vuka Karadžića bb, 36300 Novi Pazar, Serbia*

A series of fifteen novel 1,3,4-thiadiazole amide derivatives containing protocatechuic acid moiety was synthesized and structurally characterized. In addition, the corresponding imino and amino analogues of phenyl substituted 1,3,4-thiadiazole amide derivative were prepared in order to compare effects of the structural changes on radical scavenging activity. The obtained compounds were examined for their antioxidative potential using DPPH and ABTS assays, including density functional theory (DFT) and cyclic voltammetry. The tested compounds showed high antioxidative potential compared to the referent antioxidants ascorbic acid and nordihydroguaiaretic acid (NDGA). Based on the calculated thermodynamic parameters and electrochemistry it can be concluded which mechanism represents the most probable reaction pathway for the radical scavenging activity of examined compounds.