

## Antimicrobial Evaluation and Docking Study of Some 2-Aryl-5-(Pyridin-3-Yl)-1,3,4-Oxadiazole Derivatives

Saad ALGHAMDI<sup>1</sup>, Mazen M. ALMEHMADI<sup>2</sup> & Mohammad ASIF<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup> Laboratory Medicine Department, Faculty of Applied Medical Sciences, Umm Al-Qura University, Makkah, 21955, Saudi Arabia

<sup>2</sup> Department of Clinical Laboratory Sciences, College of Applied Medical Sciences, Taif University, P.O. Box 11099, Taif 21944, Saudi Arabia

<sup>3</sup> Glocal School of Pharmacy, Glocal University, Mirzapur Pole, 247,121, Saharanpur, Uttar Pradesh, India

**SUMMARY.** 1,3,4-oxadiazoles are interesting compounds because of their valuable biological effects. A new series of some 2-aryl-5-(pyridin-3-yl)-1,3,4-oxadiazole derivatives (**3a-3h**) were synthesized and screened for their antimicrobial activity. These compounds (**3a-3h**) were prepared from the reaction of nicotinic acid with ethyl alcohol converted into ethyl nicotinate (**1**) by esterification. Compound (**1**) is converted to nicotinohydrazide (**2**) by treating with hydrazine hydrate. Compound **2** is converted to compounds **3a-3h** by treating with appropriate aromatic carboxylic acids in the presence of POCl<sub>3</sub>. Confirm of structures of the synthesized compounds by using IR, <sup>1</sup>HNMR, and MS spectroscopy. All the title compounds were tested for *in vitro* antibacterial activity against *Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis* (Gram-positive), *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli* (Gram-positive) bacteria, and antifungal activity against *Candida albicans* and *Aspergillus niger*. Most of the compounds showed good activity against all the organisms. Compounds **3b**, **3d**, **3e**, **3g**, **3j**, and **3l** showed the highest activity against bacteria strains when compared to the standard ciprofloxacin. Compounds **3b**, **3d**, **3e**, **3g**, **3j**, **3k**, and **3l** were showed better antifungal activity against fungal strains as compared to the standard drug griseofulvin.

**RESUMEN.** Los 1,3,4-oxadiazoles son compuestos interesantes debido a sus valiosos efectos biológicos. Se sintetizó una nueva serie de algunos derivados de 2-aryl-5-(piridin-3-il)-1,3,4-oxadiazol (**3a-3h**) y se analizó su actividad antimicrobiana. Estos compuestos (3a-3h) se prepararon a partir de la reacción del ácido nicotínico con alcohol etílico convertido en nicotinato de etilo (**1**) por esterificación. El compuesto (**1**) se convierte en nicotinohidrazida (**2**) mediante tratamiento con hidrato de hidrazina. El compuesto **2** se convierte en los compuestos 3a-3h mediante tratamiento con ácidos carboxílicos aromáticos apropiados en presencia de POCl<sub>3</sub>. Confirme las estructuras de los compuestos sintetizados mediante espectroscopia IR, <sup>1</sup>HNMR y MS. Se analizó la actividad antibacteriana *in vitro* de todos los compuestos del título contra *Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis* (Gram-positiva), *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli* (Gram-positiva) y actividad antifúngica contra *Candida albicans* y *Aspergillus niger*. La mayoría de los compuestos mostraron buena actividad contra todos los organismos. Los compuestos **3b**, **3d**, **3e**, **3g**, **3j** y **3l** mostraron la mayor actividad contra las cepas bacterianas en comparación con la ciprofloxacina estándar. Los compuestos **3b**, **3d**, **3e**, **3g**, **3j**, **3k** y **3l** mostraron una mejor actividad antifúngica frente a cepas fúngicas en comparación con el fármaco estándar griseofulvina.

**KEY WORDS:** antifungal agents, heterocyclic compounds, *in vitro* antibacterial agents, oxadiazole.

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: aasif321@gmail.com