



УКРАЇНА

(19) UA

(11) 80808

(13) U

(51) МПК

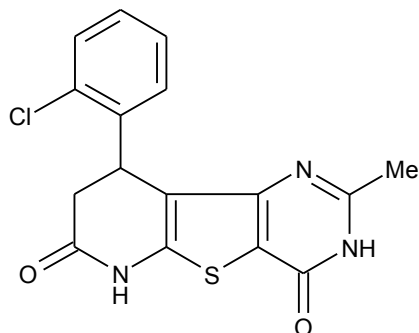
C07D 221/02 (2006.01)

C07D 221/06 (2006.01)

ДЕРЖАВНА СЛУЖБА  
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ  
ВЛАСНОСТІ  
УКРАЇНИ

**(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ****(21)** Номер заявки: **u 2012 14925****(22)** Дата подання заявки: **26.12.2012****(24)** Дата, з якої є чинними  
права на корисну  
модель: **10.06.2013****(46)** Публікація відомостей  
про видачу патенту: **10.06.2013, Бюл.№ 11****(72)** Винахідник(и):**Доценко Віктор Вікторович (UA),  
Кривоколіско Сергій Геннадійович (UA)****(73)** Власник(и):**СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ  
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА  
ДАЛЯ,  
квартал Молодіжний, 20-а, м. Луганськ,  
91034 (UA)****(54)** **2-МЕТИЛ-4,7-ДІОКСО-9-(2-ХЛОРФЕНІЛ)-3,4,6,7,8,9-ГЕКСАГІДРОПІРИДО[3',2':4,5]ТІЄНО[3,2-d]ПІРИМІДИН****(57)** Реферат:

2-Метил-4,7-діоксо-9-(2-хлорфеніл)-3,4,6,7,8,9-гексагідропіридо[3',2':4,5]-тієно[3,2-d]піримідин формули

**UA 80808 U**



Корисна модель належить до галузі органічного синтезу, а саме до нових похідних 3,4,6,7,8,9-гексагідропіrido[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідину, які можуть знайти своє застосування як сполуки з направленою біологічною дією або "будівельні блоки" для отримання нових цінних органічних сполук [наприклад, G. Wagner, S. Leistner, H. Vieweg, U. Krasselt, J. Prantz, Pharmazie, 1993, 48, 342; N. Boehm, U. Krasselt, S. Leistner, G. Wagner, Pharmazie, 1992, 47, 897; M. A. J. Awad, A. E. Abdel-Rahman, E. A. Bakhtie, Phosph., Sulfur and Silicon and Relat. Elem., 1991, 57, 293].

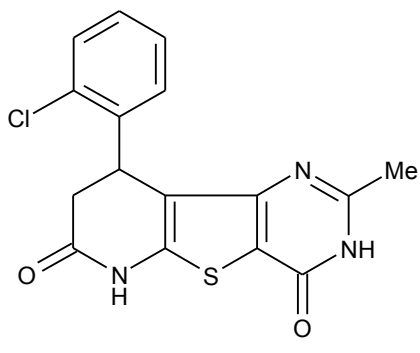
Найбільш близькими до сполуки, що заявляється, є ряд поліконденсованих гетероциклів - похідних піrido[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідину [огляди: В.П. Литвинов, С.Г. Кривоколыско, В.Д. Дяченко, Химия гетероцикл. соедин., 1999, № 5, 579; В. П. Литвинов, Изв. АН. Сер. хим., 1998, 2123; В. П. Литвинов, В.К. Промоненков, Ю.А. Шаранин, А.М. Шестопалов, в кн. Итоги науки и техники. Серия Органическая химия, Т. 17, Москва, 1989, 72].

Спільною суттєвою ознакою вказаних сполук та корисної моделі є те, що ці сполуки містять у своєму складі систему конденсованих гетероциклів піrido[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідину.

Корисна модель, на відміну від прототипу, має частково гідровану структуру, яка містить інший набір замісників: метильну, оксо-, 2-хлорфенільну групи.

Задача корисної моделі - створення нового похідного 3,4,6,7,8,9-гексагідропіrido[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідину.

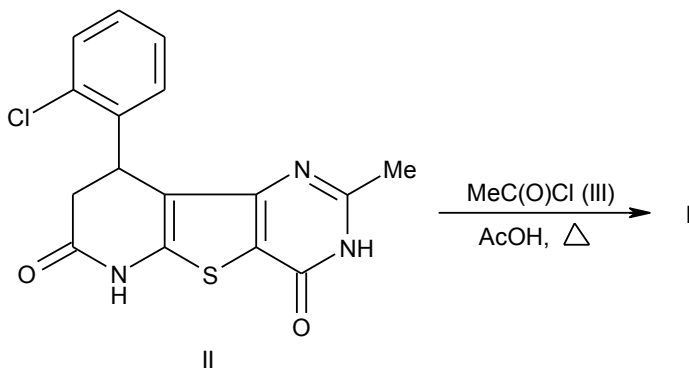
У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - 2-метил-4,7-діоксо-9-(2-хлорфеніл)-3,4,6,7,8,9-гексагідропіrido[3',2':4,5]-тієно[3,2-d]піримідин формули (I)



(I).

Сполука (I) та способи її отримання в патентних виданнях не описані.

2-Метил-4,7-діоксо-9-(2-хлорфеніл)-3,4,6,7,8,9-гексагідропіrido[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідин (I) (вихід 75 %) отримують наступним чином: до суспензії 1 г (3.1 ммоль) тієнопіримідину (II) [В.В. Доценко, С.Г. Кривоколыско, В.П. Литвинов, Химия гетероцикл. соедин., 2003, 1, 117] в 10 мл оцтової кислоти додають 0.44 мл (6.2 ммоль) ацетилхлориду (III), суміш кип'яють 6 годин; осадок, що утворився, відфільтровують, промивають етанолом



II

Структура сполуки, що заявляється, підтверджується спектрами ЯМР  $^1\text{H}$ , знятими на приладі "Gemini 200" (200 МГц) в  $\text{DMSO-d}_6$  (внутрішній стандарт - ТМС), ІЧ-спектри отримували на спектрофотометрі "ІКС-29" у вазеліновій олії. Елементний аналіз проводили на приладі "Perkin-Elmer C, H, N-Analyzer". Контроль індивідуальності синтезованої сполуки проводили методом ТШХ на пластинках "Silufol UV-254" у системі ацетон-гептан (1:1), проявлення - в парах йоду, ІЧ-детектор. Температури плавлення визначали на столику Кофлера та не корегували.

Одержаний продукт має достатню чистоту для аналізу та подальшого використання.

Корисна модель підтверджується наступним прикладом, який ілюструє, але не обмежує його об'єм.

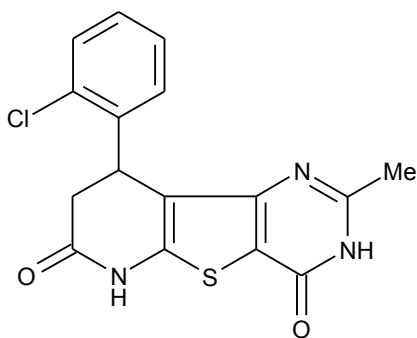
Приклад.

2-Метил-4,7-діоксо-9-(2-хлорфеніл)-3,4,6,7,8,9-гексагідропіридо[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідин (I). Т. плавл. > 300 °С, дрібні кристали білого кольору. Знайдено, %: С 56.50; Н 3.60; N 12.12. С<sub>16</sub>Н<sub>12</sub>СlN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S. Вираховано, %: С 55.57; Н 3.58; N 12.15. ІЧ-спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 1660, 1680 (2 C=O), 3420, 3465 (2 NH). Спектр ЯМР <sup>1</sup>Н, δ, м.д., J/Гц: 12.24 (1 Н, розш. с, N(3)Н); 11.03 (1 Н, с, N(6)Н); 6.64-7.46 (4 Н, м, Ar); 4.80 (1 Н, розш. псевдод, C(9)Н); 3.15 (1 Н, м, C(8)Н); 2.59 (1 Н, розш. псевдод, <sup>2</sup>J=16.2, C(8)Н); 2.24 (3 Н, с, Me).

Таким чином, 2-метил-4,7-діоксо-9-(2-хлорфеніл)-3,4,6,7,8,9-гексагідропіридо[3',2':4,5]тієно[3,2-d]піримідин (I) за структурними та фізико-хімічними властивостями суттєво відрізняється від сполук порівняння.

#### ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

2-Метил-4,7-діоксо-9-(2-хлорфеніл)-3,4,6,7,8,9-гексагідропіридо[3',2':4,5]-тієно[3,2-d]піримідин формули



Комп'ютерна верстка І. Мироненко

Державна служба інтелектуальної власності України, вул. Урицького, 45, м. Київ, МСП, 03680, Україна

ДП "Український інститут промислової власності", вул. Глазунова, 1, м. Київ – 42, 01601