



УКРАЇНА

(19) UA

(11) 80811

(13) U

(51) МПК

C07D 251/08 (2006.01)

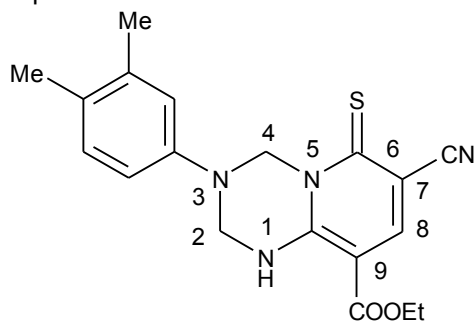
C07D 251/14 (2006.01)

C07D 251/72 (2006.01)

ДЕРЖАВНА СЛУЖБА
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
УКРАЇНИ

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ**(21)** Номер заявки: **u 2012 14930****(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) ЕТИЛОВИЙ ЕСТЕР 3-(3,4-ДИМЕТИЛФЕНІЛ)-6-ТІОКСО-7-ЦІАНО-1,3,4,6-2Н-ПІРИДО[1,2-а][1,3,5]ТРИАЗИН-9-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ****(57)** Реферат:

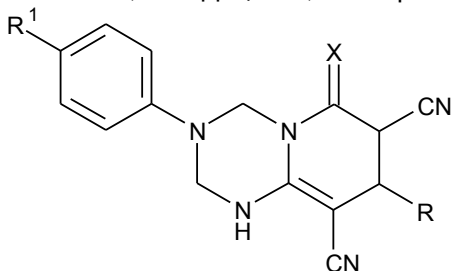
Етиловий естер 3-(3,4-диметилфеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти



UA 80811 U

Корисна модель належить до галузі органічного синтезу, а саме до заміщених піридо[1,2-а][1,3,5]триазины, які можуть знайти своє застосування як сполуки з направленою фармацевтичною дією або "будівельні блоки" для отримання нових цінних органічних сполук.

Найбільш близькими до корисної моделі, що заявляється, є ряд гетероциклічних сполук [С.Г. Кривоколыско, В.В. Доценко, К.А. Фролов, Пат. України, 2011, 59695] загальної формули:



де R, R¹ = алкіл, арил, гетарил; R = H, SMe; X=S, Se.

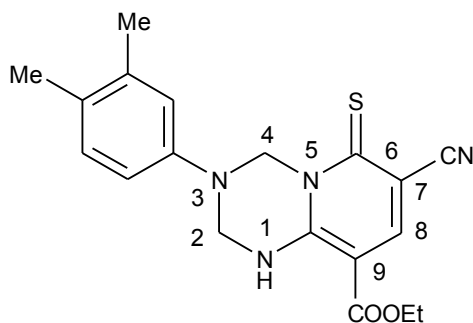
Спільною суттєвою ознакою прототипу та корисної моделі, що заявляється, є те, що ці сполуки містять базову структуру піридо[1,2-а][1,3,5]-триазины.

Корисна модель, на відміну від прототипу, містить у дев'ятому положенні її конденсованих циклів етоксикарбонільну групу.

Задачею корисної моделі є створення нового заміщеного піридо[1,2-а][1,3,5]триазины.

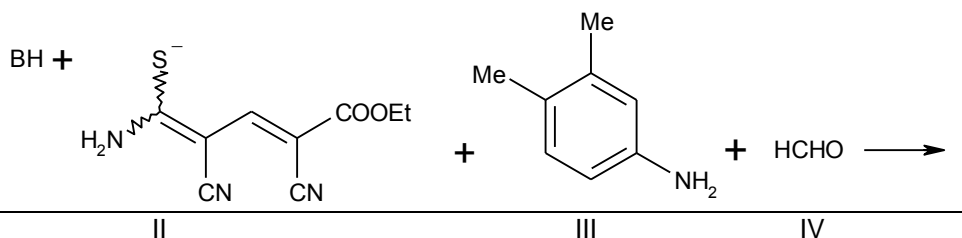
У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - етиловий естер 3-(3,4-диметилфеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти формули (I).

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



(I)

Синтез етилового естеру 3-(3,4-диметилфеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (I) (вихід 73 %) здійснюють наступним чином: суміш 3.1 ммоль бутадієнтіолату (II) [В.Д. Дяченко, Р.П. Ткачев, Ж: орг. химии, 2002. - № 38. - С. 768; В.В. Доценко, С.Г. Кривоколыско, Э.Б. Русанов, А.В. Гутов, В.П. Литвинов, Химия гетероцикл. соед., 2007. - С. 1075], 3.1 ммоль аміну (III) та 5 мл 37 % розчину формальдегіду (формаліну) (IV) в 15-20 мл етанолу при інтенсивному перемішуванні кип'ятять 3 хвилини, потім перемішують 2 години при ~20 °С, осад відфільтровують, промивають етанолом, для аналітичних цілей перекристалізують з суміші ацетону та диметилформаміду (4:1).



B = N-метилморфолін.

Структура сполуки, що заявляється, підтверджується спектрами ЯМР ¹H, знятими на приладі "Varian Gemini 200" (200 МГц) в ДМСО-d₆ (внутрішній стандарт - ТМС), ІЧ-спектри отримували на спектрофотометрі "ИКС-29" у вазеліновій олії. Елементний аналіз проводили на приладі "Perkin-Elmer C, H, N-Analyzer". Контроль індивідуальності синтезованих сполук

проводили методом ТШХ на пластинках "Silufol UV-254", у системі ацетон-гептан (1:1), проявлення пари йоду, ІЧ-детектор.

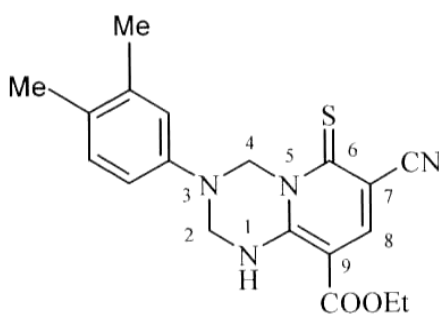
Одержаний продукт має достатню чистоту для аналізу та для подальшого використання.

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

Приклад.

Етиловий естер 3-(3,4-диметилфеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (І). Т. плавл. 207-209 °С (розк.), кристали жовтого кольору. Знайдено, %: С 61,88; Н 5,49; N 15,28. $C_{19}H_{20}N_4O_2S$. Вирахувано, %: С 61,94; Н 5,47; N 15,21. ІЧ-спектр, ν , cm^{-1} : 1675 (C=O), 2225 (C≡N), 3210 (NH). Спектр ЯМР 1H , δ , м.д., J/Гц: 9,94 (1H, розш. с, NH); 7,95 (1H, с, C(8)H); 6,98 (1H, д, J=7,9, Ar, C(6)H); 6,78 (1H, розш. с, Ar, C(2)H); 6,65 (1H, д, J=7,9, Ar, C(5)H); 6,00 (2H, розш. с, C(4)H₂); 5,12 (2H, розш. с, C(2)H₂); 4,24 (2H, кв, J=7.1, CH₂CH₃); 2,21 та 2,14 (обидва по 3H, с, 2 Me); 1,34 (3H, т, J=7,1, CH₂CH₃)-

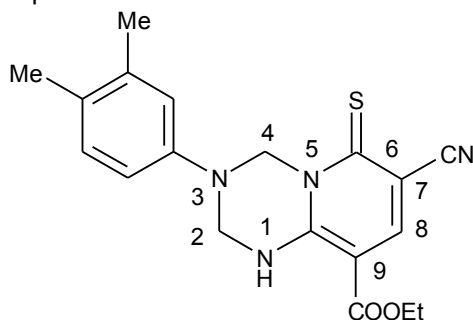
Таким чином, етиловий естер 3-(3,4-диметилфеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (І) за структурними та фізико-хімічними властивостями суттєво відрізняється від сполук порівняння.



20

ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

Етиловий естер 3-(3,4-диметилфеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти



25

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