



УКРАЇНА

(19) **UA**

(11) **80812**

(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 14931**

(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 6-ТІОКСО-3-(2-ФУРИЛМЕТИЛ)-7-ЦІАНО-1,3,4,6-2Н-ПІРИДО[1,2-  
а][1,3,5]ТРИАЗИН-9-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ**

**(57) Реферат:**

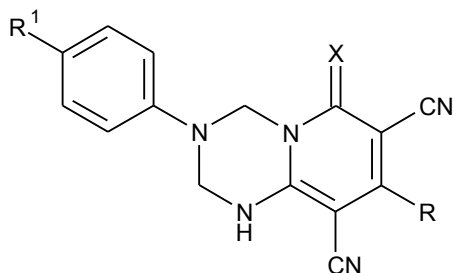
Етиловий естер 6-тіоксо-3-(2-фурилметил)-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5] триазин-9-карбонової кислоти.

**UA 80812 U**



Корисна модель належить до галузі органічного синтезу, а саме до заміщених піридо[1,2-а][1,3,5]триазину, 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=алкил, арил, гетарил; R=H, SMe; X=S, Se.

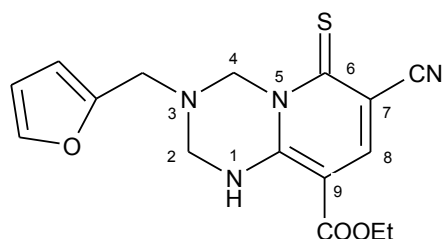
Спільною суттєвою ознакою найближчого аналога та корисної моделі, що заявляється, є те, що ці сполуки містять базову структуру піридо [1,2-а][1,3,5]-триазину.

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

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

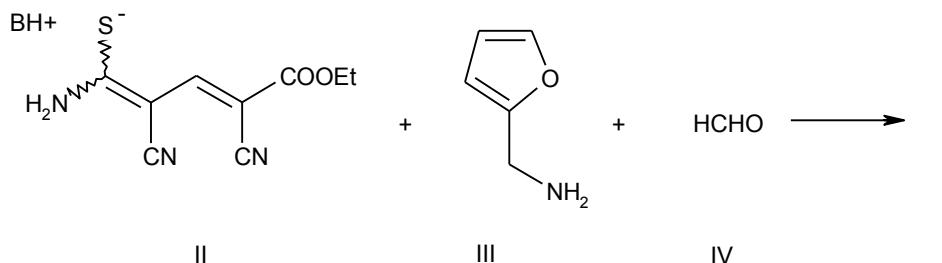
У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - етиловий естер 6-тіоксо-3-(2-фурилметил)-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти формули (I).

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



(I)

Синтез етилового естеру 6-тіоксо-3-(2-фурилметил)-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (I) (вихід 85 %) здійснюють наступним чином: суміш 3.1 ммоль бутадієнтіолату (II) [В.Д. Дяченко, Р.П. Ткачев, Ж. орг. химии, 2002, 38, 768; В.В. Доценко, С.Г. Кривоколыско, Э.Б. Русанов, А.В. Гутов, В.П. Литвинов, Химия гетероцикл. соед., 2007, 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 диметилформаміду та етанолу (1:1).



B=N-метилморфолін

Структура сполуки, що заявляється, підтверджується спектрами ЯМР <sup>1</sup>H, знятими на приладі "Varian Gemini 200" (200 МГц) в ДМСО-d<sub>6</sub> (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 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.

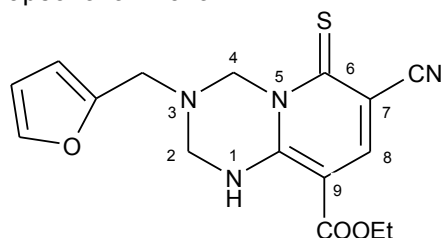
Приклад

Етиловий естер 6-тіоксо-3-(2-фурилметил)-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піrido[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (І). Т. плавл. 211-213 °С. Знайдено, %: С 56.03; Н 4.71; N 16.13.  $C_{16}H_{16}N_4O_3S$ . Вирахувано, %: С 55.80; Н 4.68; N 16.27. ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 1675 ( $C=O$ ), 2220 ( $C\equiv N$ ), 3200 (NH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м.ч., J/Гц: 9.74 (1H, розш. с, NH); 8.01 (1H, с, C(8)H); 7.47, 6.34 та 6.27 (по 1H, м, фурил); 5.39 (2H, розш. с, C(4)H<sub>2</sub>); 4.54 (2H, розш. с, C(2)H<sub>2</sub>); 4.28 (2H, кв, J=7.2, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>); 2.84 (2H, с, NCH<sub>2</sub>-C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>O) 1.34 (3H, т, J=7.2, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>).

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

#### ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

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




---

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