



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **85085** (13) **U**
(51) МПК (2013.01)
C07D 211/00

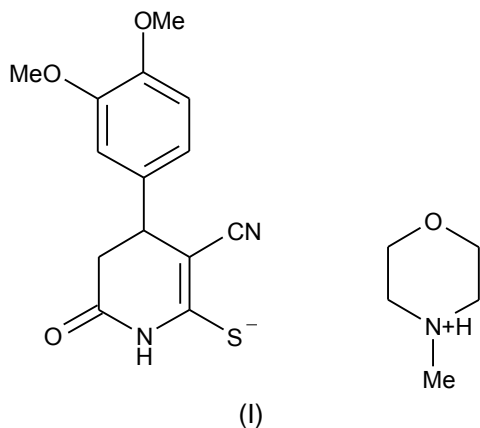
(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

(21) Номер заявки: u 2013 05890	(72) Винахідник(и): Доценко Віктор Вікторович (UA), Кривоколіско Сергій Геннадійович (UA)
(22) Дата подання заявки: 13.05.2013	
(24) Дата, з якої є чинними права на корисну модель: 11.11.2013	(73) Власник(и): СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ, квартал Молодіжний, 20-а, м. Луганськ, 91034 (UA)
(46) Публікація відомостей про видачу патенту: 11.11.2013, Бюл.№ 21	

(54) 4-(3,4-ДИМЕТОКСИФЕНІЛ)-2-ОКСО-5-ЦІАНО-1,2,3,4-ТЕТРАГІДРОПІРИДИН-6-ТІОЛАТ N-МЕТИЛМОРФОЛІНІЮ **N-**

(57) Реферат:

4-(3,4-Диметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат
N-метилморфолінію (I)



UA 85085 U

Корисна модель належить до галузі органічного синтезу, а саме до нових частково гідрованих заміщених піридинів, які можуть знайти своє застосування як сполуки з направленою фармацевтичною дією або "будівельні блоки" для отримання нових цінних органічних сполук (наприклад, агоністів прогестеронових рецепторів [Wang Y., Duraiswami Ch., Graybill T.L., Madauss K.P., Tran Th.B., Williams Sh. P., Deng S.-J., Jones D.G., Hammond M., Gryglenko E.T., Bray J.D., Thompson S.K., Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, 2009, vol. 19, # 17, p. 4916-4919]).

Найбільш близькими до сполуки, що заявляється, є декілька похідних ароматичних або аліфатичних альдегідів, 2-ціанотіоацетаміду, кислоти Мелдрума та N-метилморфоліну [Дяченко В.Д., Кривоколосько С.Г., Литвинов В.П. Известия АН, Серия химическая, 1997, № 10, - С. 1852-1856; Кривоколосько С.Г., Дяченко В.Д., Литвинов В.П. Химия гетероциклических соединений, 1998, № 10, - С. 1381-1383; Кривоколосько С.Г., Дяченко В.Д., Литвинов В.П. Известия АН, Серия химическая, 1999, № 12, - С. 2333-2336; Нестеров В.Н., Кривоколосько С.Г., Дяченко В.Д., Доценко В.В., Литвинов В.П. Известия АН, Серия химическая, 1997, № 5, - С. 1029-1034].

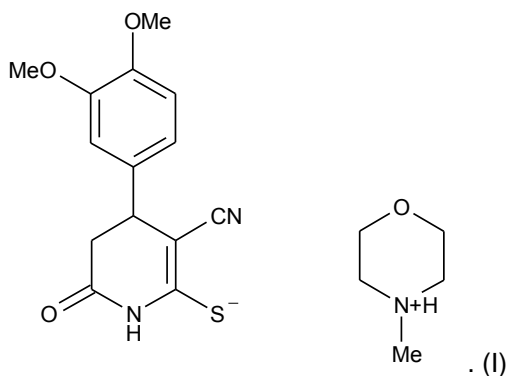
Спільною суттєвою ознакою прототипу та корисної моделі є те, що ці сполуки стосуються групи похідних 1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолатів N-метилморфолінію.

Корисна модель, на відміну від прототипу, містить у четвертому положенні тетрагідропіридинового циклу 3,4-диметоксифенільний замісник.

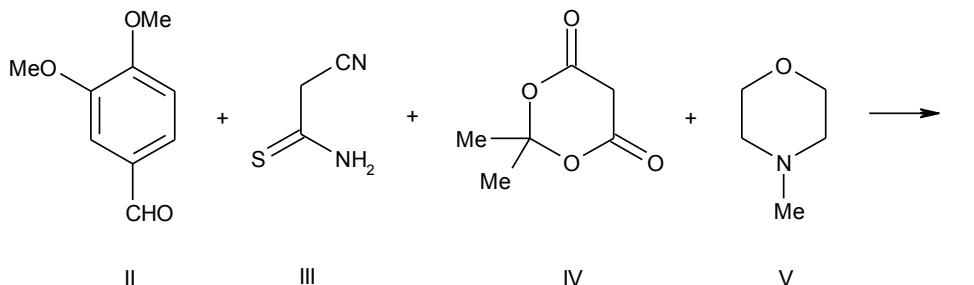
Задачею корисної моделі є створення нового похідного 1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолатів N-метилморфолінію.

У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - 4-(3,4-диметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію формули (I).

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



Синтез 4-(3,4-диметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолату N-метилморфолінію (I) здійснюють наступним чином: суміш 4,3 ммоль альдегіду (II), 4,3 ммоль 2-ціанотіоацетаміду (III), 4,3 ммоль кислоти Мелдрума (IV), 8,6 ммоль N-метилморфолінію (V) в 35 мл етанолу кип'яють 3 години, після чого залишають на 12 годин при кімнатній температурі; осад, що утворився, відфільтровують, промивають ацетоном.



Структура сполуки, що заявляється, підтверджується спектрами ЯМР ^1H , знятими на приладі "Bruker Avance II 400" (399.97 МГц) в DMSO-d_6 (внутрішній стандарт - ТМС), ІЧ-спектри отримували на спектрофотометрі "ИК-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 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.

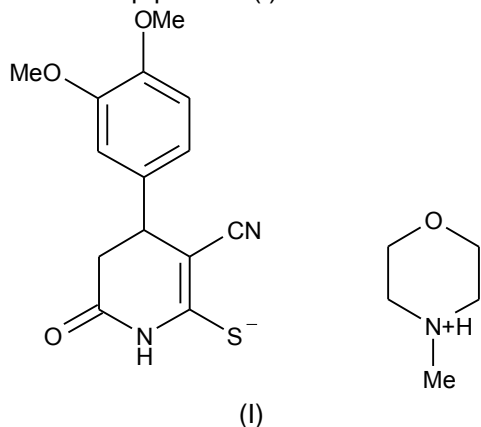
Приклад

- 5 4-(3,4-Диметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I). Вихід 70 %. Т. плавл. 135 °С (з розк.), кристали білого кольору. Знайдено, %: С, 58,42; Н, 6,55; N, 10,60. $C_{19}H_{25}N_3O_4S$. Вирахувано, %: С, 58,29; Н, 6,44; N, 10,73. ІЧ-спектр, ν , cm^{-1} (вазелинова олія): 3555-3225 (NH, NH'); 2174 (CN); 1654 (C=O). Спектр ЯМР 1H , δ , м. ч.: 2,38 (дд., 1H, C(3)H, $^2J=15,6$, $^3J=3,6$); 2,67 (дд., 1H, C(3)H, $^2J=15,6$, $^3J=6,4$); 2,78 (с, 3H, NMe); 3,16, 3,80 (обидва м, по 4H, CH_2NCH_2 та CH_2OCH_2); 3,59 (псевдот, 1H, C(4)H); 3,74, 3.76 (обидва с, по 3H, (MeO) $_2$); 6,66-6,82 (м, 3H, Ar); 8.10 (розш. с, 1H, NH).
- 10 Таким чином, 4-(3,4-диметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I) за структурними та фізико-хімічними властивостями суттєво відрізняється від сполук порівняння.

15

ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

4-(3,4-Диметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I)



20

Комп'ютерна верстка В. Мацело

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