



УКРАЇНА

(19) UA

(11) 85090

(13) U

(51) МПК

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 2013 05897

(22) Дата подання заявки: 13.05.2013

(24) Дата, з якої є чинними
права на корисну
модель: 11.11.2013(46) Публікація відомостей
про видачу патенту: 11.11.2013, Бюл.№ 21

(72) Винахідник(и):

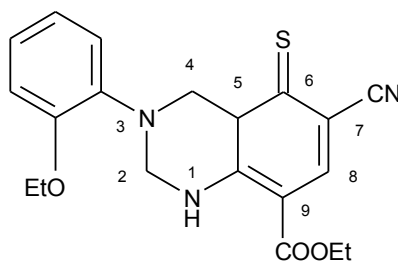
Доценко Віктор Вікторович (UA),
Кривоколіско Сергій Геннадійович (UA)

(73) Власник(и):

СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА
ДАЛЯ,
квартал Молодіжний, 20-а, м. Луганськ,
91034 (UA)(54) ЕТИЛОВИЙ ЕСТЕР 3-(2-ЕТОКСИФЕНІЛ)-6-ТІОКСО-7-ЦІАНО-1,3,4,6-2Н-ПІРИДО[1,2-
а][1,3,5]ТРИАЗИН-9-КАРБОНОВОЇ КИСЛОТИ

(57) Реферат:

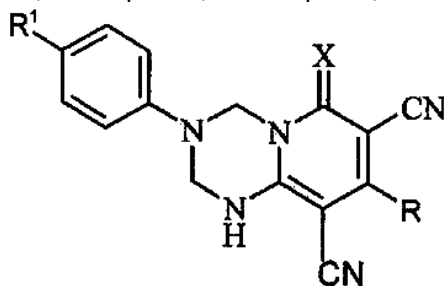
Етиловий естер 3-(2-етоксибеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]тріазин-9-карбонОВОЇ кислоти



UA 85090 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, R' = алкіл, арил, гетарил; R = H, SMe; X=S, Se.

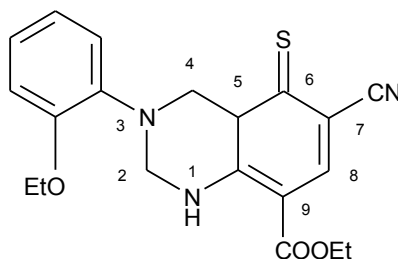
Спільною суттєвою ознакою прототипу та корисної моделі, що заявляється, є те, що ці сполуки містять базову структуру піридо[1,2-а][1,3,5]-триазину.

В основу корисної моделі поставлена задача на відміну від прототипу, містить у дев'ятому положенні її конденсованих циклів етоксикарбонільну групу.

Поставлена задача вирішується тим, що створення нового заміщеного піридо[1,2-а][1,3,5]триазину.

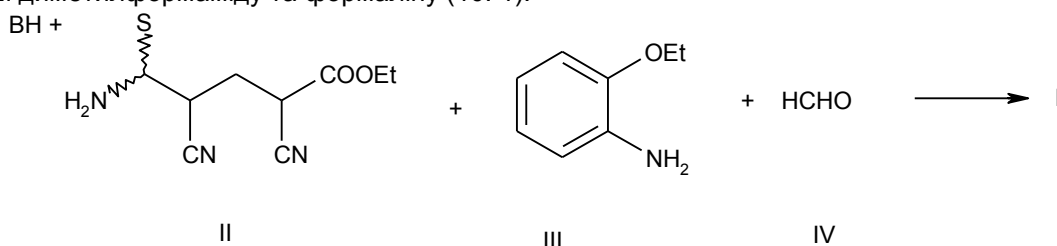
У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - етиловий естер 3-(2-етоксифеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (I).

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



(I)

Синтез етилового естеру 3-(2-етоксифеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піридо[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (I) (вихід 83 %) 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'ять 3 хвилини, потім перемішують 2 години при ~ 20 °С, осад відфільтровують, промивають етанолом, для аналітичних цілей перекристалізують з суміші диметилформаміду та формаліну (10: 1).



B=N-метилморфолін.

Структура сполуки, що заявляється, підтверджується спектрами ЯМР ^1H , знятими на приладі "Varian Gemini 200" (200 МГц) в DMSO-d_6 (внутрішній стандарт - TMS), 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.

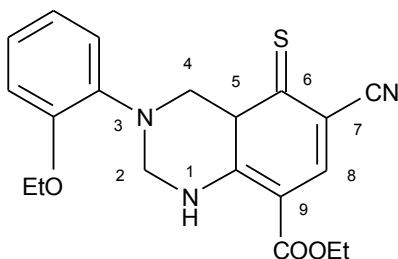
Приклад.

Етиловий естер 3-(2-етоксифеніл)-6-тіоксо-7-ціано-1,3,4,6-2Н-піrido[1,2-а][1,3,5]триазин-9-карбонової кислоти (I). Т. плавл. 225-228 °С, кристали жовтого кольору. Знайдено, %: С 58.90; Н 5.27; N 14.68. $C_{19}H_{20}N_4O_3S$. Вираховано, %: С 59.36; Н 5.24; N 14,57. ІЧ-спектр, ν , cm^{-1} : 1690 (C=O), 2230 (C≡N), 3175 (NH). Спектр ЯМР 1H , δ , м.д., J/Гц: 9.93 (1H, розш. с, NH); 8.03 (1H, с, C(8)H); 6.90 (2H, м, Ar, C(3)H та C(6)H); 6.72 (2H, м, Ar, C(4)H та C(5)H); 5.97 (2H, розш. с, C(4)H₂); 5.06 (2H, розш. с, C(2)H₂); 4.25 (2H, кв, J=7.1, COOCH₂CH₃); 4.09 (2H, кв, J=6.9, OCH₂CH₃); 1.45 (3H, т, J=6.9, OCH₂CH₃); 1.32 (3H, т, J=7.1, COOCH₂CH₃).

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

ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

Етиловий естер 3-(2-етоксифеніл)-6-тіоксо-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