



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **85093** (13) **U**
(51) МПК (2013.01)
C07D 211/00

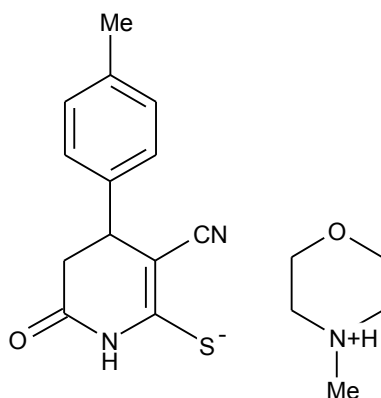
(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

| | |
|---|--|
| (21) Номер заявки: u 2013 05900 | (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) 2-ОКСО-4-(п-ТОЛІЛ)-5-ЦІАНО-1,2,3,4-ТЕТРАГІДРОПІРИДИН-6-ТІОЛАТ N-МЕТИЛМОРФОЛІНІЮ

(57) Реферат:

2-Оксо-4-(п-толil)-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I)



(I)

UA 85093 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., Кривоколыско С.Г., Литвинов В.П., Известия АН, Серия химическая, 1997, № 10, с. 1852-1856; Кривоколыско С.Г., Дяченко В.Д., Литвинов В.П., Химия гетероциклических соединений, 1998, № 10, с. 1381-1383; Кривоколыско С.Г., Дяченко В.Д., Литвинов В.П., Известия АН, Серия химическая, 1999, № 12, с. 2333-2336; Нестеров В.Н., Кривоколыско С.Г., Дяченко В.Д., Доценко В.В., Литвинов В.П., Известия АН, Серия химическая, 1997, № 5, с. 1029-1034].

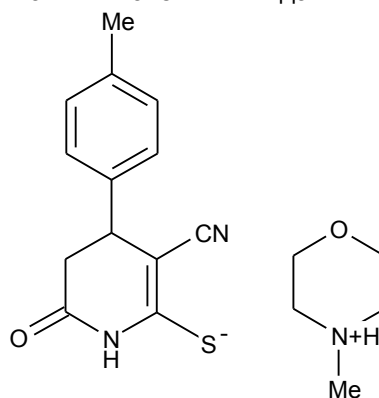
Спільною суттєвою ознакою прототипу та корисної моделі є те, що ці сполуки належать до групи похідних 1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолатів N-метилморфолінію.

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

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

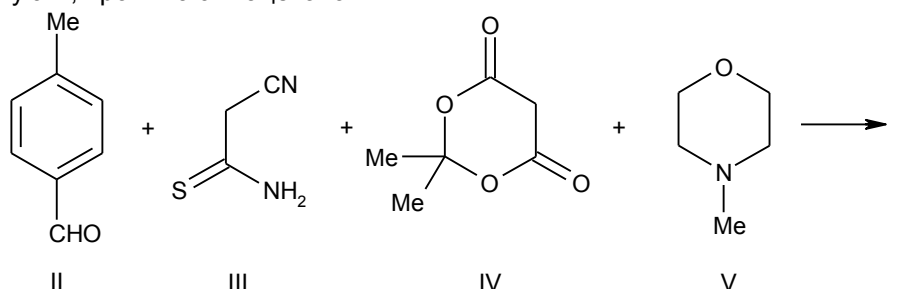
У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - 2-оксо-4-(п-толіл)-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію формули (I).

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



(I)

Синтез 2-оксо-4-(п-толіл)-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-метилморфоліну (V) в 35 мл етанолу кип'ятять 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.

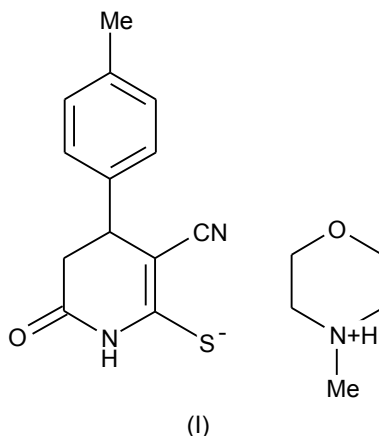
Приклад.

2-Оксо-4-(п-толіл)-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I). Вихід 71 %. Т. плавл. 130 °С (з розк.), кристали білого кольору. Знайдено, %: С, 62.77; Н, 6.82; N, 12.31. $C_{18}H_{23}N_3O_2S$. Вирахувано, %: С, 62.58; Н, 6.71; N, 12.16. ІЧ-спектр, ν , cm^{-1} (вазелинова олія): 3540-3165 (NH, NH⁺); 2170 (CN); 1662 (C=O). Спектр ЯМР ¹H, δ , м.д.: 2.28 (с, 3H, Me_{арил}); 2.40 (д.д., 1H, C(3)H, ²J=16.0, ³J=4.3); 2.69 (д.д., 1H, C(3)H, ²J=16.0, ³J=7.2); 2.75 (с, 3H, NMe); 3.11, 3.76 (обидва м, по 4H, CH₂NCH₂ та CH₂OCH₂); 3.60 (м, 1 H, C(4)H); 7.06 (розш. с, 4 H, Ar); 8.23 (розш. с, 1H, NH).

Таким чином, 2-оксо-4-(п-толіл)-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I) за структурними та фізико-хімічними властивостями суттєво відрізняється від сполук порівняння.

ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

15 2-Оксо-4-(п-толіл)-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I)



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