



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) **UA** (11) **85094** (13) **U**
(51) МПК (2013.01)
C07D 211/00

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

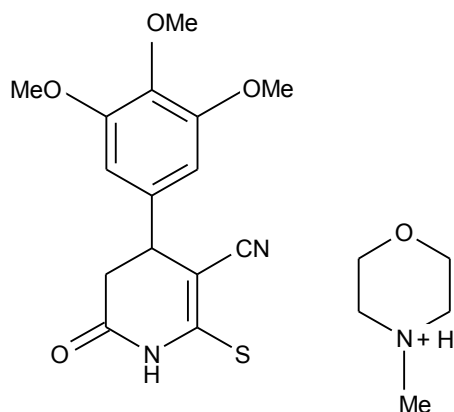
(21) Номер заявки: u 2013 05901	(72) Винахідник(и): Доценко Віктор Вікторович (UA), Кривоколіско Сергій Геннадійович (UA)
(22) Дата подання заявки: 13.05.2013	
(24) Дата, з якої є чинними права на корисну модель: 11.11.2013	(73) Власник(и): СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА ДАЛЯ, квартал Молодіжний, 20-а, м. Луганськ, 91034 (UA)
(46) Публікація відомостей про видачу патенту: 11.11.2013, Бюл.№ 21	

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

(57) Реферат:

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

N-



UA 85094 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, Grygienko 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].

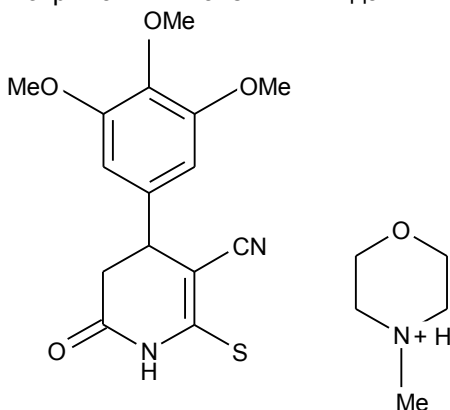
Спільною суттєвою ознакою прототипу та корисної моделі є те, що ці сполуки належать до групи похідних 1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолатів N-метилморфолінію.

Корисна модель, на відміну від прототипу, містить у четвертому положенні тетрагідропіридинового циклу 3,4,5-триметоксифенільний замісник.

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

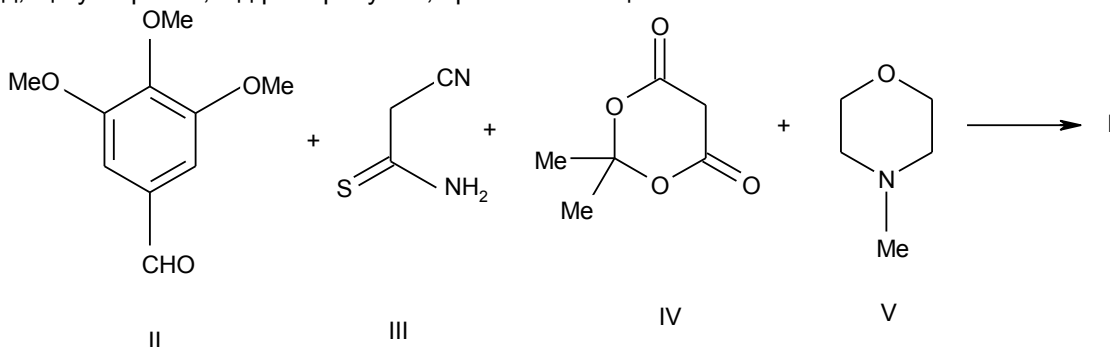
У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - 4-(3,4,5-триметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію формули (I).

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



(I)

Синтез 4-(3,4,5-триметоксифеніл)-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-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 $\text{DMSO}-d_6$ (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 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.

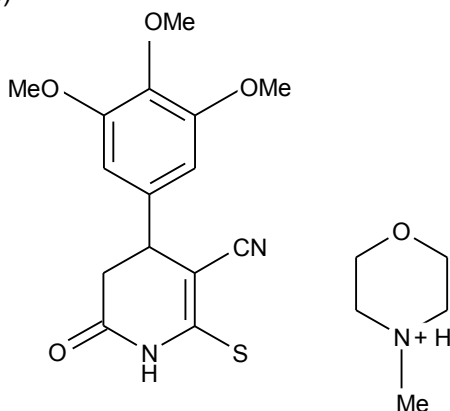
Корисна модель підтверджується наступним прикладом, який ілюструє, але не обмежує його об'єм.

Приклад.

- 5 4-(3,4,5-Триметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію (I). Вихід 67 %. Т. плавл. 145 °С (з розк.), кристали білого кольору. Знайдено, %: С, 57.32; Н, 6.37; N, 10.08. $C_{20}H_{27}N_3O_5S$. Вирахувано, %: С, 56.99; Н, 6.46; N, 9.97. ІЧ-спектр, ν , cm^{-1} (вазілінова олія): 3550-3260 (NH, NH^+); 2160 (CN); 1670 (C=O). Спектр ЯМР 1H , δ , м.д.: 2.40 (д.д., 1 H, C(3)H, $^2J=16.2$, $^3J=4.8$); 2.67 (д.д., 1 H, C(3)H, $^2J=16.2$, $^3J=7.0$); 2.77 (с, 3 H, NMe); 3.15, 3.82 (обидва м, по 4 H, CH_2NCH_2 та CH_2OCH_2); 3.60 (м, 1 H, C(4)H); 3.65 (с, 3 H, MeO); 3.76 (с, 6 H, (MeO) $_2$); 6.45 (с, 2 H, .Ar); 8.19 (розш. с, IH,NH).
- 10

Таким чином, 4-(3,4,5-триметоксифеніл)-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.

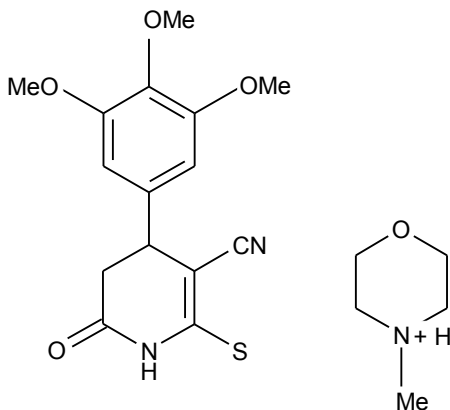
- 15 4-(3,4,5-Триметоксифеніл)-2-оксо-5-ціано-1,2,3,4-тетрагідропіридин-6-тіолат N-метилморфолінію формули (I)



ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

20

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



(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