



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) **UA**

(11) **85089**

(13) **U**

(51) МПК

C07D 251/72 (2006.01)

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

(21) Номер заявки: **u 2013 05896**

(22) Дата подання заявки: **13.05.2013**

(24) Дата, з якої є чинними
права на корисну
модель: **11.11.2013**

(46) Публікація відомостей **11.11.2013, Бюл.№ 21**
про видачу патенту:

(72) Винахідник(и):

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

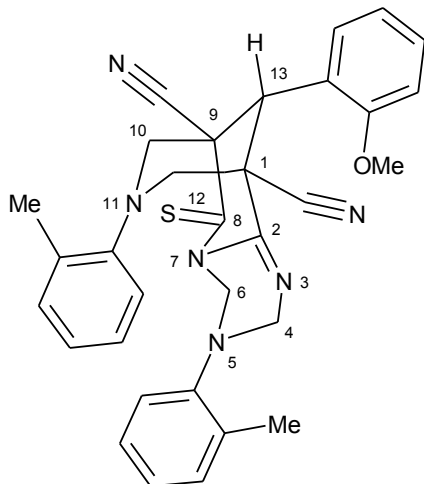
(73) Власник(и):

**СХІДНОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ВОЛОДИМИРА
ДАЛЯ,
квартал Молодіжний, 20-а, м. Луганськ,
91034 (UA)**

(54) **5,11-ДИ(2-МЕТИЛФЕНІЛ)-13-(2-МЕТОКСИФЕНІЛ)-8-ТІОКСО-3,5,7,11-ТЕТРААЗАТРИЦИКЛО[7.3.1.0^{2,7}]ТРИДЕЦ-2-ЕН-1,9-ДИКАБОНІТРИЛ**

(57) Реферат:

5,11-Ди(2-метилфеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил



UA 85089 U

Корисна модель належить до галузі органічного синтезу, а саме до нових похідних 3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ену, які можуть знайти своє застосування як сполуки з направленою біологічною дією або "будівельні блоки" для отримання нових цінних органічних сполук. Прикладом можуть бути похідні 3,7-діазабіцикло[3.3.1]нонану (біспідину) [A.

- 5 Samhammer, U. Holzgrabe, R. Haller, Arch. Pharm. (Weinheim), 1989, 322 (9), 551; U. Kuhl, W. Englberger, M. Haurand, U. Holzgrabe, Arch. Pharm. Pharm. Med. Chem., 2000, 333, 226; U. Kuhl, M. von Korff, K. Baumann, C. Burschka, U. Holzgrabe, J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 2001, 2037; T. Siener, U. Holzgrabe, S. Drosihn, W. Brandt, J. Chem. Soc, Perkin Trans. 2, 1999, 1827; Y. Miyahara, K. Goto, T. Inazu, Synthesis, 2001, 364; Н.С. Зефіров, С.В. Порозіна, Успехи Химии, 1973, XLII, 423 [Russ. Chem. Rev., 1973, 42 (3), 190]; R. Jeyaraman, S. Aliva, Chem. Rev., 1981, 81, 149; N.S. Zefirov, V.A. Palyulin, in Topics in Stereochemistry, Vol. 20, eds. E. L. Eliel and S.H. Wilen, Interscience-Wiley, New York, 1991, p. 171; P. Comba, B. Nuber, A. Ramlow, J. Chem. Soc, Dalton Trans., 1997, 347; G.D. Hosken, C.C. Allan, J. C. A. Boeyens, R.D. Hancock, J. Chem. Soc, Dalton Trans., 1995, 3705; С.З. Вацадзе, Н.В. Зык, Р.Д. Рахимов, К.П. Бутин, Н.С. Зефіров, Изв. АН, Сер. хим., 1995, 456 [Russ. Chem. Bull., 1995, 44, 440]; G.D. Hosken, R.D. Hancock, J. Chem Soc, Chem. Commun., 1994, 1363; D. St. C. Black, G.B. Deacon, M. Rose, Tetrahedron, 1995, 51, 2055; С.В. Емец, Н.И. Курто, В.А. Палюлин, Н.С. Зефіров, К.А. Потехин, А.Е. Лысов, Вестн. МГУ, Сер. 2. Химия, 2001, 42 (6), 390, та

- Джерела інформації:, яка там цитується: Avail. URL: <http://www.chem.msu.su/rus/vmgu/>; [Vestn. Mosk. Univ., Ser. Khim., 2001 (Engl. Transl.)]; W. Brandt, S. Drosihn, M. Haurand, U. Holzgrabe, C. Nachtsheim, Arch. Pharm. (Weinheim), 1996, 329(6), 311; Y. Wang, K. Tang, S. Inan, D. Siebert, U. Holzgrabe, D. Y. W. Lee, P. Huang, J.-G. Li, A. Cowan, L.-Y. Liu-Chen, J. Pharm. Exp. Therap., 2005, 312, 220; G.L. Arutyunyan, A.A. Chachoyan, V.A. Shkulev, G.G. Adamyan, T.E. Agadzhanyan, B.T. Garibdzhanyan, Pharm. Chem. 1, 1995, 29 (3), 188 [Хим.-фарм. журн., 1995, 29 (3), 33]; K.D. Berlin, G.L. Garrison, S. Sangiah, C.R. Clarke, C.L. Chen, R. Lazzara, B.J. Scherlag, E.S. Patterson, G.E. Burrows, US Pat 5468858, 1995; Avail. URL: <http://patft.uspto.gov/netahtml/srchnum.htm>.

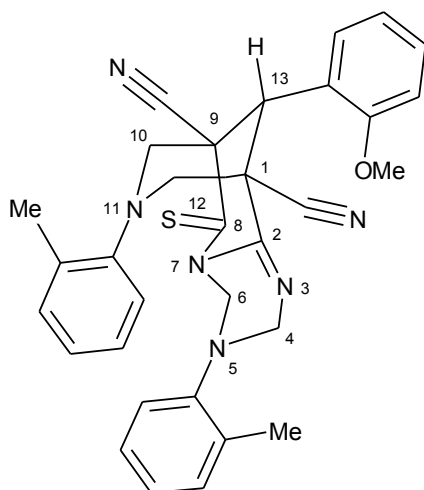
- Найбільш близькими до сполуки, що заявляється, є похідні 8-тіоксо-13-спіро-1'-циклогексан(або циклопентан)-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ен-1,9-дикарбонітрилу та 8-тіоксоспіро[3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ен-13,4'-піперидин]-1,9-дикарбонітрилу [V.V. Dotsenko, S.G. Krivokolysko, A.N. Chernega, V.P. Litvinov, Monatsh. fuer Chem., 2007, 138 (1), 35; V.V. Dotsenko, S.G. Krivokolysko, V.P. Litvinov, E.B. Rusanov, Doklady Chem., 2007, 413 (1), 68 [Doklady Akad. Nauk, 2007, 413 (3), 345]; V.V. Dotsenko, S.G. Krivokolysko, A.N. Chernega, V.P. Litvinov, Russ. Chem. Bull, 2007, 56 (5), 1053; 35 V.V. Dotsenko, S.G. Krivokolysko, V.P. Litvinov, Chem. Heterocycl. Comp., 2007, 43(11), 1455].

Спільною суттєвою ознакою вказаних сполук та корисної моделі є те, що ці сполуки стосуються малочисельної групи похідних 3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ену.

- Корисна модель, на відміну від прототипу, містить у п'ятому та одинадцятому положеннях конденсованих циклів 2-метилфенільні замісники, а в тринадцятому - 2-метоксифенільний замісник та атом гідрогену.

Задача корисної моделі - створення нового похідного 3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ену.

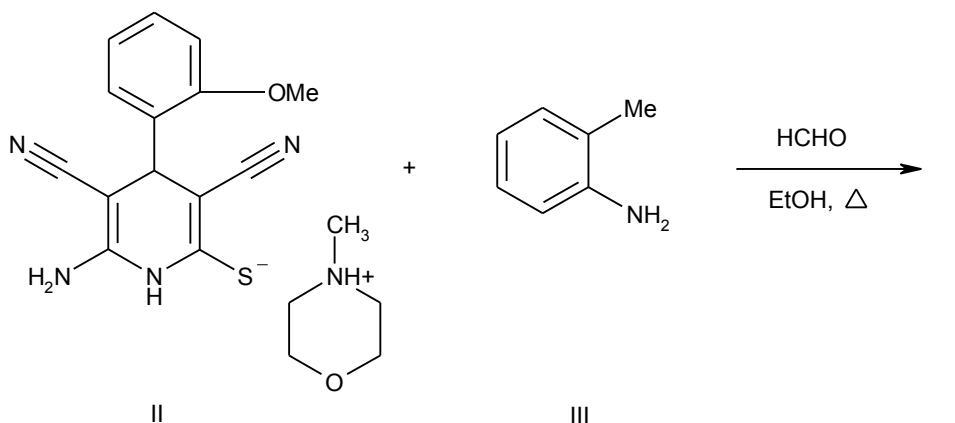
- У відповідності до цього в корисній моделі пропонується нова сполука - 5,11-ди(2-метилфеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I).



I

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

5,11-Ди(2-метилфеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I) (вихід 72 %) отримують наступним чином: до суспензії 2,5 ммоль тіолату (II) в 20 мл етанолу додають надлишок (4-5 мл) 37 % формаліну, суміш нагрівають при перемішуванні до повного розчинення, до неї додають 5,0 ммоль первинного аміну (III), потім кип'ятять 3 хвилини та перемішують 5 годин при ~ 20 °С. Осад сполуки (I) відфільтровують, промивають етанолом та гексаном.



II

III

Структура сполуки, що заявляється, підтверджується спектрами ЯМР ¹H, знятими на приладі "Gemini 200" (200 МГц) в ДМСО-d₆ (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 - в парах йоду, ІЧ-детектор. Температури плавлення визначали на столику Кофлера та не корегували.

Одержаний продукт має достатню чистоту для аналізу та подальшого використання.

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

Приклад

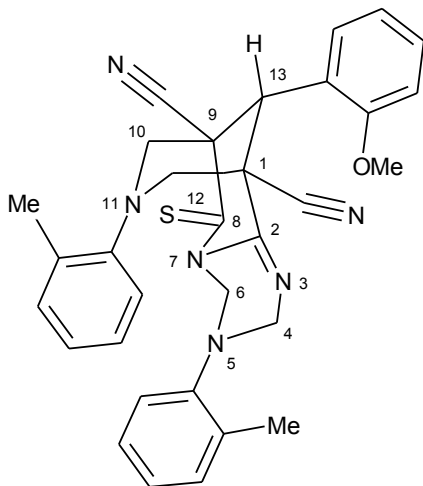
5,11-Ди(2-метилфеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I). Т. плавл. 240-243 °С, кристали жовтого кольору. Знайдено, %: С, 71,09; Н, 5,48; N, 15,55. С₃₂Н₃₀N₆OS. Вирахувано, %: С, 70,30; Н, 5,53; N, 15,37. ІЧ-спектр, ν, см⁻¹: 2245 (C≡N), 1655 (C=N). Спектр ЯМР ¹H, δ, м. ч., J/Гц: 1,84, 2,40 (обидва с, по 3H, 2H₃C-Ar); 3,55-3,99 (м, 4H, накладення сигналів C(10)H₂ та C(12)H₂); 3,94 (с, 3H, MeO); 4,72 (с, 1H, C(13)H); 4,95 (дд, 2H, C(6)H₂, ²J=17,0); 5,68 (дд, 2H, C(4)H₂, ²J=13,2); 6,70-7,40 (м, 12H, 3Ar).

Таким чином, 5,11-Ди(2-метилфеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I) за структурними та фізико-хімічними властивостями суттєво відрізняється від сполук порівняння.

5

ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

5,11-Ди(2-метилфеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ен-1,9-дикарбонітрил



10

Комп'ютерна верстка Л. Литвиненко

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