



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ
УКРАЇНИ

УКРАЇНА

(19) UA

(11) 85091

(13) U

(51) МПК

C07D 251/72 (2006.01)

(12) ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА КОРИСНУ МОДЕЛЬ

(21) Номер заявки: **u 2013 05898**

(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)**

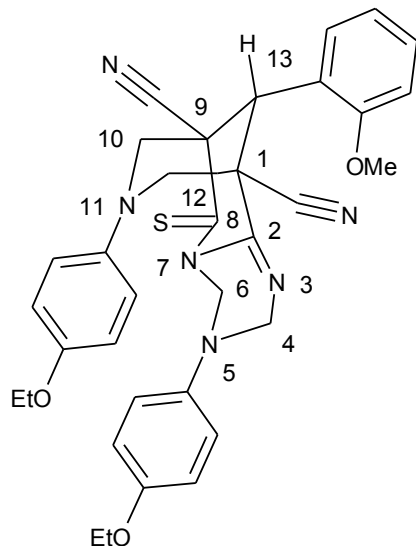
(73) Власник(и):

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

**(54) 5,11-Ді(4-ЕТОКСИФЕНІЛ)-13-(2-МЕТОКСИФЕНІЛ)-8-ТІОКСО-3,5,7,11-
ТЕТРААЗАТРИЦИКЛО[7.3.1.0^{2,7}]ТРИДЕЦ-2-ЕН-1,9-ДИКАРБОНІТРИЛ**

(57) Реферат:

5,11-Ді(4-етоксифеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил



UA 85091 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 (біспидину) [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. Рогозіна, 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; G. 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, які 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. J., 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>.

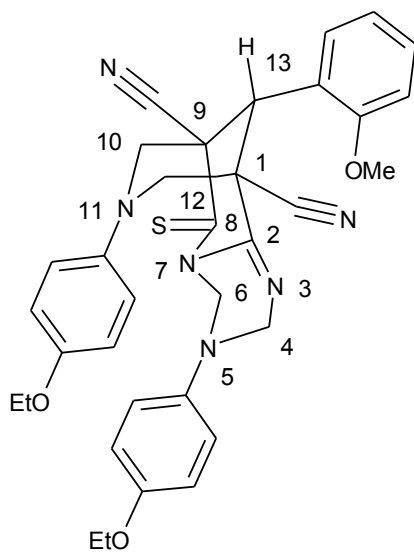
- Найбільш близькими до сполуки, що заявляється, є похідні 8-тіоксо-13-спіро-1'-циклогексан(або циклопентан)-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридек-2-ен-1,9-дикарбонітрилу та 8-тіоксоспіро[3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридек-2-ен-13,4'-піперидин]-1,9-дикарбонітрилу [V.V. Dotsenko, 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; V.V. Dotsenko, S.G. Krivokolysko, V.P. Litvinov, Chem. Heterocycl. Comp., 2007, 43 (11), 1455].

- 35 Спільною суттєвою ознакою вказаних сполук та корисної моделі є те, що ці сполуки належать до 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 4-етоксифенільні замісники, а в тринадцятому - 2-метоксифенільний замісник та атом гідрогену.

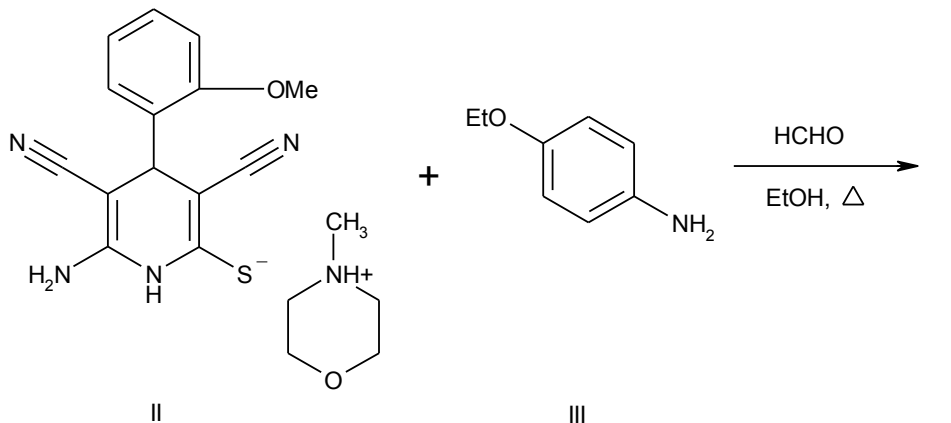
- 40 В основу корисної моделі поставлена задача - створення нового похідного 3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридець-2-ену.

Поставлена задача вирішується тим, що пропонується нова сполука - 5,11-Ді(4-етоксифеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}] тридець-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I).



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

- 5,11-Ді(4-етоксифеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I) (вихід 77 %) 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.



- 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 "ИКС-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.

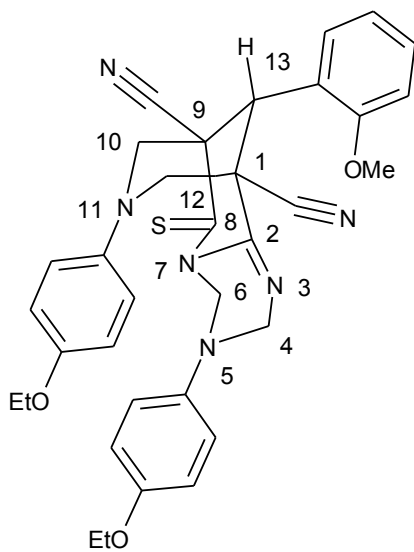
Приклад.

- 5,11-Ді(4-етоксифеніл)-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. 207-209 °С, кристали жовтого кольору (з Me₂CO: MeOH = 1:1). Знайдено, %: С, 66.70; Н, 5.69; N, 13.94. C₃₄H₃₄N₆O₃S. Вирахувано, %: С, 67.31; Н, 5.65; N, 13.85. ІЧ-спектр, ν, см⁻¹: 2250 (CN), 1660 (C=N), 1510 (C=S). Спектр ЯМР ¹H, δ, м.д., J/Гц: 1.38 (кв, 6 Н, накладання сигналів, 2 CH₃CH₂O, ³J=7.0); 3.70-4.00 (м, 8 Н, 2 CH₃CH₂O, C(10)H₂, C(12)H₂); 3.91 (с, 3 Н, MeO); 4.60 (с, 1 Н, C(13)H); 5.03 (кв, 2 Н, C(6)H₂, ²J=16.8); 5.76 (кв, 2 Н, C(4)H₂, ²J=13.2); 6.44-7.41 (м, 12 Н, 3 Ar).

Таким чином, 5,11-Ді(4-етоксифеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил (I) за структурними та фізико-хімічними властивостями суттєво відрізняється від сполук порівняння.

ФОРМУЛА КОРИСНОЇ МОДЕЛІ

5,11-Ді(4-етоксифеніл)-13-(2-метоксифеніл)-8-тіоксо-3,5,7,11-тетраазатрицикло[7.3.1.0^{2,7}]тридец-2-ен-1,9-дикарбонітрил



5

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