

K AUTORSKÉMU OSVEDČENIU



ÚŘAD PRO VYNÁLEZY
A OBJEVY

(61)

(23) Výstavná priorita

(22) Prihlášené 15 07 83

(21) (PV 5330-83)

(40) Zverejnené

14 05 84

(45) Vydané

01 04 87

(51) Int. Cl.³ C 07 D 491/22

(75)

Autor vynálezu

KOREŇOVÁ ANNA RNDr.,

KRUTOŠÍKOVÁ ALŽBETA doc. ing. CSc.,

KOVÁČ JAROSLAV prof. ing. DrSc., BRATISLAVA

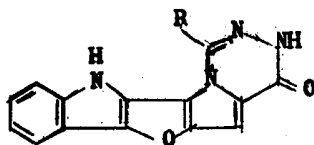
(54)

1,2-Dihydro-1,2,4-triazino[4'',5'':1',5']pyrolo[2,3:4,5]furo[3,2-b]indol-1-óny
a spôsob ich prípravy

Vynález sa týka odboru organickej chémie a rieši prípravu nových zlúčenín 1,2-dihydro-1,2,4-triazino[4'',5'':1',5']pyrolo[2',3':4,5]furo[3,2-b]indol-1-onov. Podstata spôsobu prípravy zlúčenín podľa vynálezu spočíva v tom, že sa hydrazid kyseliny 1,9-dihdropyrolo[2',3':4,5]furo[3,2-b]indol-2-karboxylovej zahrieva s trietylésterom kyseliny ortomravčej alebo ortooctovej v dimetylformamide pri teplote 100 - 153 °C.

Zlúčeniny podľa vynálezu patria k novej skupine kondenzovaných heterocyklov obsahujúcich furánové jadro a môžu nájsť uplatnenie ako východiskové látky pre rôzne typy heterocyklických zlúčenín.

1,2-Dihydro-1,2,4-triazino-
[4'',5'':1',5']pyrolo-[2',3':4,5]furo
[3,2-b]indol-1-ony sú charakterizované
všeobecným vzorcom



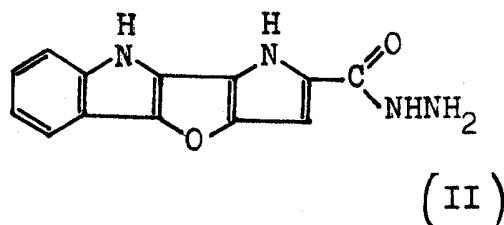
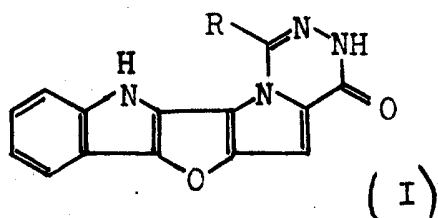
kde R je H a CH₃.

Vynález sa týka 1,2-dihydro-1,2,4-triazíno[4'',5'':1',5']pyrrolo[2',3':4,5]furo[3,2-b]indol-1-ónov a spôsobu ich prípravy. Uvedené zlúčeniny, ktoré môžu slúžiť ako východzie látky pre syntézu nových furokondenzovaných heterocyklických zlúčenín, neboli doposiaľ pripravené.

Zlúčeniny s prikondenzovaným 1,2,4-triazínovým jadrom sa pripravujú reakciou dusíkových heterocyklov s hydrazidoskupinou v polohe "2" s ortoestermi karboxylových kyselín / Monge Vega A., Aldana I., Rabbani M.M., Fernandes-Alvares E.: J.Heterocycl. Chem. 17, 77 /1980//. Niektoré z nich sú popísané ako biologicky účinné látky / Monge Vega A., Aldana I., Fernandes-Alvares E.: Eur.J.Med.Chem. 13, 573 /1978//.

Príprava hydrazidu kyseliny 1,9-dihydropyrrolo[2',3':4,5]furo[3,2-b]indol-2-karboxylovej je popísaná AO 230342.

Predmetom vynálezu sú 1,2-dihydro-1,2,4-triazíno[4'',5'':1',5']pyrrolo[2',3':4,5]furo[3,2-b]indol-1-óny všeobecného vzorca I



kde R je ^{alebo} HCH_3 a spôsob ich prípravy.

Podstata spôsobu prípravy 1,2-dihydro-1,2,4-triazíno-
 $[4'',5'':1',5']$ pyrolo $[2',3':4,5]$ furo $[3,2-b]$ indol-1-ónov vzorca
 I spočíva v tom, že sa na hydrazid kyseliny 1,9-dihdropyrolo-
 $[2',3':4,5]$ furo $[3,2-b]$ indol-2-karboxylovej AO 230342.
 vzorca II pôsobí trietylésterom kyseliny ortomravčej alebo
 orteoctovej v dimetylformamide pri teplote 100 - 153°C.

Výhody spôsobu prípravy zlúčenín podľa vynálezu spočí-
 vajú okrem iného v tom, že syntéza je jednostupňová, uskutoč-
 ňuje sa v jednoduchej aparatúre s dobrými výťažkami.

1,2-Dihydro-1,2,4-triazíno $[4'',5'':1',5']$ pyrolo $[2',3':4,5]$
 furo $[3,2-b]$ indol-1-óny majú široké použitie ako rôzne reakčné
 komponenty v organickej syntéze. Reagujú s pentasulfidom fos-
 forečným na korešpondujúce tióny, s trichloridom fosforečným
 na chlórderiváty. Taktiež poskytujú možnosť prikondenzovania
 ďalšieho heterocyklického kruhu.

Predmet vynálezu ilustrujú, ale neobmedzujú nasledovné
 príklady:

Príklad 1

1,2-Dihydro-1,2,4-triazíno $[4'',5'':1',5']$ pyrolo $[2',3':4,5]$
 furo $[3,2-b]$ indol-1-ón

Hydrazid kyseliny 1,9-dihdropyrolo $[2',3':4,5]$ furo $[3,2-b]$
 indol-2-karboxylovej /2,54 g, 0,01 mol/ a trietyléster kyseli-
 ny ortomravčej /2,0 g, 0,014 mol/ v dimetylformamide /10 ml/
 sa zahrieva pri teplote varu po dobu 2,5 h. Po ochladení sa
 zrazenina odsaje a kryštalizuje z dimetylformamidu.

Príklad 2

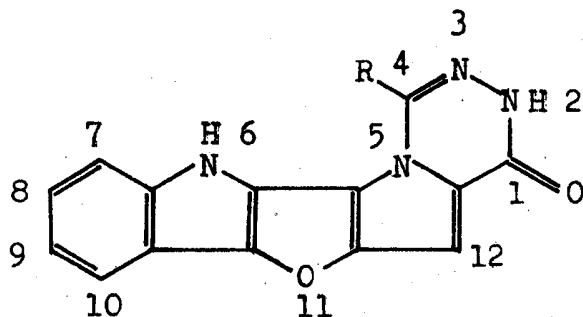
4-Metyl-1,2-dihydro-1,2,4-triazíno [4'',5'':1',5'] pyrolo
[2',3':4,5] furo [3,2-b] indol-1-ón

Hydrazid kyseliny 1,9-dihydropyrolo [2',3':4,5] furo [3,2-b]
indol-2-karboxylovej /2,54 g, 0,01 mol/ a trietyléster kyseli-
ny ortoocetovej /1,8 g, 0,011 mol/ sa zahrieva pri teplote varu
po dobu 3 hodín. Rozpúšťadlo sa vákuovo oddestiluje a zvyšok
sa prekryštalizuje z dimetylformamidu.

Štruktúra zlúčenín bola dokázaná elementárnou analýzou
/ tab. I/ a IR a ¹H NMR spektrami / tab. II/.

Spektrálne merania

Infračervené spektrá sa namerali na spektrofotometri
SPECORD 71IR / Carl Zeiss Jena/. ¹H NMR spektrá boli namera-
né na 80 MHz spektrometri BS 487 C Tesla v hexadeuterodimetyl-
sulfoxide za použitia vnútorného štandardu hexametyldisiloxánu.



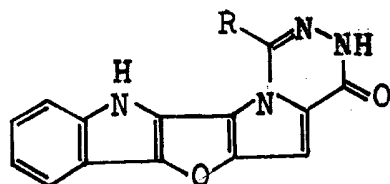
Tabuľka I

1,2-Dihydro-1,2,4-triazino [4'',5'':1',5'] pyrrolo [2',3':4,5] furo [3,2-b] indol-1-óny

Zlúčenina	Sum. vzorec Mol hm.	T.t. °C Výťažok %	Elementárna analýza vypočít. / nájdené		
			% C	% H	% N
I a R = H	C ₁₄ H ₈ N ₄ O ₂ 264,2	230 r 79	63,63 63,48	3,05 2,93	21,20 21,10
I b R = CH ₃	C ₁₅ H ₁₀ N ₄ O ₂ 278,3	255 r 76	64,74 64,60	3,62 3,53	20,13 20,32

Tabuľka II

IR a ¹H NMR spektrá zlúčenín Ia, Ib.



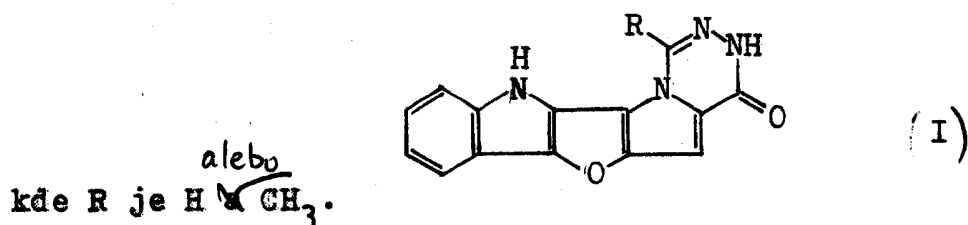
Zlúčenina	R	ν _{C=O}	δ / ppm /			
			H ₄	H ₁₂	H _{arom}	C ₄ -CH ₃
I a	H	1651 cm ⁻¹	8,79d	7,29d	7,00 - 7,75m	-
I b	CH ₃	1655 cm ⁻¹	-	7,17s	7,07 - 7,80m	2,86s

Pre R = H J_{4,12} = 0,8 Hz

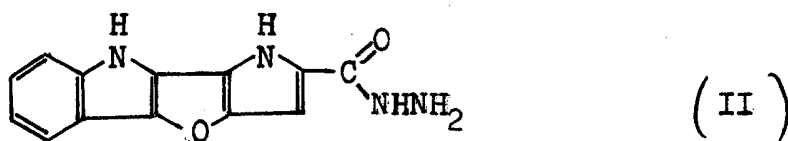
P R E D M E T V Y N Á L E Z U

232 192

1. 1,2-Dihydro-1,2,4-triazíno $[4'',5'':1',5']$ pyrolo $[2',3':4,5]$ furo $[3,2-b]$ indol-1-óny všeobecného vzorca I



2. Spôsob prípravy 1,2-dihydro-1,2,4-triazíno $[4'',5'':1',5']$ pyrolo $[2',3':4,5]$ furo $[3,2-b]$ indol-1-ónov podľa bodu 1 vyznačený tým, že sa na hydrazid kyseliny 1,9-dihydropyrol- $[2',3':4,5]$ furo $[3,2-b]$ indol-2-karboxylovej vzorca II



pôsobí trietylesterní kyseliny ortomravčej alebo ortoocetovej v dimetylformamide pri teplote 100 - 153°C.