

Тематическое направление: Физико-химические исследования превращений в ряду 2,4-диметил-6-оксо-1,6-дигидропиридин-3-карбоксамид. Часть 1.

Синтез и рентгендифракционное исследование производных 2,4-диметил-6-оксо-1,6-дигидропиридин-3-карбоксамид

© Фекличева (Окуль)¹ Екатерина Максимовна, Рыбаков^{1*+} Виктор Борисович,
Бабаев² Евгений Вениаминович и Офицеров³ Евгений Николаевич

¹ Кафедра общей химии. Химический факультет. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Воробьевы Горы, 1-3. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (495) 939-36-54.

E-mail: rybakov20021@yandex.ru; okulem@struct.chem.msu.ru

² Кафедра органической химии. Химический факультет. Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова. Воробьевы Горы, 1-3. г. Москва, 119991. Россия. Тел.: (985) 997-94-75.

E-mail: babaev@org.chem.msu.ru

³ Кафедра химии и технологии биомедицинских препаратов. Факультет химико-фармацевтических технологий и биомедицинских препаратов. Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева. Миусская пл., 9. г. Москва, 125047. Россия. Тел.: (499) 978-61-32.

E-mail: ofitser@mail.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пиридоны-2, пиридин, перегруппировки, циклизации, рециклизация, комбинаторная химия, фенацилирование, оксазол, индолизин, рентгеноструктурный анализ.

Аннотация

На основе синтезированного исходного 2,4-диметил-6-оксо-1,6-дигидропиридин-3-карбоксамид, кристаллизующегося в виде дигидрата, посредством оригинальных перегруппировок и циклизаций получены 9 его производных, в том числе *O*- и *N*-фенацил замещенные продукты. Из последнего препарата в присутствии кислоты получен соответствующий перхлорат оксазолпиридиния, из которого под действием азотистого основания получен индолизин.

Методом монокристаллической дифракции исследованы молекулярные и кристаллические структуры всех полученных соединений: 2,4-диметил-6-оксо-1,6-дигидропиридин-3-карбоксамид дигидрат, 6-гидрокси-2,4-диметил-3-карбамоилпиридиний хлорид моногидрат, 2,4-диметил-6-метоксипиридин-3-карбоксамид, 1-[2-(4-метилфенил)-2-оксоэтил]-2,4-диметил-6-оксо-1,6-дигидропиридин-3-карбоксамид, 2,4-диметил-6-оксо-1-[2-(4-хлорфенил)-2-оксоэтил]-1,6-дигидропиридин-3-карбоксамид, 2,4-диметил-6-[2-(4-метилфенил)-2-оксоэтокси]пиридин-3-карбоксамид, 2,4-диметил-6-[2-(4-хлорфенил)-2-оксоэтокси]-пиридин-3-карбоксамид, 6-карбамоил-2-(4-хлорфенил)-5,7-диметил[1,3]оксазоло[3,2-а]пиридин-4-ий перхлорат, 7-метил-5-морфолин-4-ил-2-(4-хлорфенил)-индолизин-8-карбоксамид. Также проведен структурный анализ побочных продуктов 1,4-бис(4-метилфенил)бутан-1,4-диола и 1,4-бис(4-хлорфенил)бутан-1,4-диола. Приведены методики синтеза каждого из них.

Проведен сравнительный анализ длин связей, валентных и торсионных углов в сходных фрагментах молекул. В структурах выявлены водородные связи и показано их влияние на прочность упаковок молекул в кристаллах.

Все структуры исследованных соединений помимо РСА охарактеризованы ЯМР ¹Н спектрами.