

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лебедев Н. Н., Козлов В. М. — ЖОрХ, 1966, т. 2, № 2, с. 261.
2. Пат. 867688 (1953) ФРГ. — С. А., 1954, vol. 48, 11487e.
3. Stapp P. R., Drake C. A. — J. Org. Chem., 1971, vol. 36, № 4, p. 522.
4. Ogata T., Sawaki T. — J. Am. Chem. Soc., 1966, vol. 88, № 24, p. 5832.
5. Авт. свид. 1154266 (1985), СССР (Геворкян А. А., Аракелян А. С., Саргсян М. С., Косян С. М., Блажин Ю. М., Огородников С. К., Маялян Ш. М., Мацоян С. Г., Казарян П. И. — Бюлл. изобр., 1985, № 17.
6. Пат. 2244243 (1974) ФРГ—РЖХ, 1975, 2Н63П.
7. Strojny E. J., Iwatsa R. T., Freve L. K. — J. Am. Chem. Soc., 1971, vol. 93, № 5, p. 1171.
8. Геворкян А. А., Казарян П. И., Саргсян М. С., Петросян К. А., Мкртумян С. А. — ХГС, 1983, № 7, с. 891.
9. Геворкян А. А., Саргсян М. С., Петросян К. А., Мкртумян С. А. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 2, с. 133.
10. Саргсян М. С., Мкртумян С. А., Геворкян А. А. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 9, с. 577.
11. Пат. 2510216 (1975) ФРГ—С. А., 1976, vol. 85, 176854.
12. Саргсян М. С., Мкртумян С. А., Геворкян А. А. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 2, с. 129.
13. Саргсян М. С., Мкртумян С. А., Геворкян А. А. — Арм. хим. ж., 1985, т. 38, № 8, с. 494.
14. Stetter H., Deor M. — Chem. Ber., 1953, Bd. 86, № 5, S. 589.
15. Пат. 3879452 (1971) США — РЖХ, 1976, 2Н49П.

Армянский химический журнал, т. 40, № 9, стр. 552—560 (1987 г.)

УДК 548.0 : 53+547.822.3+547.772:

СИНТЕЗ 1-ФЕНИЛ-3-МЕТИЛ-5-(1'-МЕТИЛ-4'-ПИПЕРИДИЛ)- ПИРАЗОЛА. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА ДИЙОДИДА 1-ФЕНИЛ-2,3-ДИМЕТИЛ- 5-(1'-МЕТИЛ-4'-ПИРИДИНИИ)ПИРАЗОЛИЯ

Р. С. ВАРТАНЯН, Р. С. ШАГИНЯН, Ж. В. КАЗАРЯН,
А. А. КАРАПЕТЯН в Ю. Т. СТРУЧКОВ

Институт тонкой органической химии им. А. Л. Минцовой
АН Армянской ССР, Ереван

Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова
АН СССР, Москва

Поступило 18 VI 1986

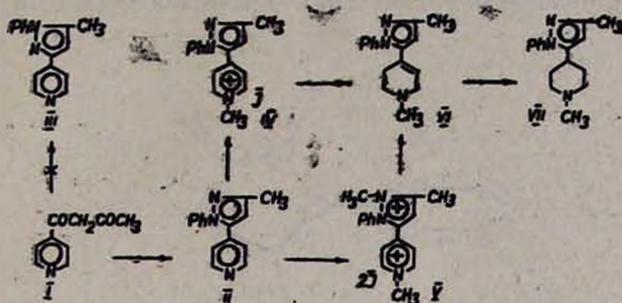
Осуществлен синтез 1-фенил-3-метил-5-(1'-метил-4'-пиперидил)пиразола. Проведено рентгеноструктурное исследование дийодида 1-фенил-2,3-диметил-5-(1'-метил-4'-пиперидил)пиразоля.

Рис. 1, табл. 3, библиографические ссылки 11.

Исследования в области синтеза функционально замещенных насыщенных шестичленных гетероциклов привели к разработке ряда способов синтеза их β-дикарбонильных производных [1—3]. Однако предложенные способы, практически в равной степени применимые для синтеза производных тетрагидропирана и тетрагидротиопирана, оказались безрезультатными для синтеза 1-(N'-алкил-4'-пиперидил)-1,3-бутан-

дионов- β -дикетонов ряда пиперидина. Целью синтеза соединений указанного типа являлось создание неконденсированных бигетероциклов ранее не известного строения для тестирования их в качестве нейротропных средств.

С целью получения фенилпиперидилпиразолов была реализована следующая схема превращений:



Взаимодействием 1-(4'-пиридил)-1,3-бутандиона, получаемого конденсацией по Кляйзену из этилового эфира изоникотиновой кислоты и ацетона [4], с фенилгидразином вместо ожидаемой смеси двух изомерных пиразолов II и III получено одно вещество, положение фенильной группы в структуре которого невозможно однозначно определить обычными спектральными методами. Полученное соединение было подвергнуто алкилированию йодистым метилом. Показано, что при использовании в качестве растворителя ацетона или метанола на холоду алкилируется только атом азота пиридинового кольца с образованием четвертичной соли IV, в то время как при нагревании смеси исходных веществ в метаноле в запаянной ампуле алкилируются атомы азота как пиридинового, так и пиразольного кольца.

С целью установления положения фенильной группы в полученных соединениях было проведено рентгеноструктурное исследование дву-четвертичной соли V. Строение катиона последней с нумерацией атомов и длинами связей показано на рисунке. В табл. 1 и 2 приведены значения валентных углов и характеристики плоских фрагментов молекулы V.

Длины связей и валентные углы имеют ожидаемые значения (рис., табл. 1). В частности, в пиридиновом и пиразольном циклах длины связей существенно выравнены и в пределах 3σ находятся в хорошем согласии со стандартными значениями для соответствующих гетероциклов [5—7], что свидетельствует о делокализации положительных зарядов в указанных кольцах.

Все три цикла катиона плоские (значения индивидуальных отклонений атома от среднеквадратичных плоскостей не превышают $0,032 \text{ \AA}$, табл. 2) и выведены из сопряжения друг с другом, по-видимому, из-за пространственных препятствий между двумя объемистыми заместителями в соседних положениях пиразольного цикла. Двугранные углы, образованные плоскостью пиразольного кольца с плоскостями пиридинового и бензольного колец, соответственно равны 25 и 62° , а двугранный

угол между плоскостями пиридинового и бензольного колец равен 73° (табл. 2).

Расстояния между катионами и анионами в кристалле V обычные для ван-дер-ваальсовых взаимодействий: так, кратчайшие контакты анион-катион I(1)...N(1) 3,719(3) и I(2)...N(9) 3,698(3) Å близки к сумме 3,65 Å ван-дер-ваальсовых радиусов соответствующих атомов [8]. Таким образом, однозначно доказано, что V имеет приведенную на схеме структуру.

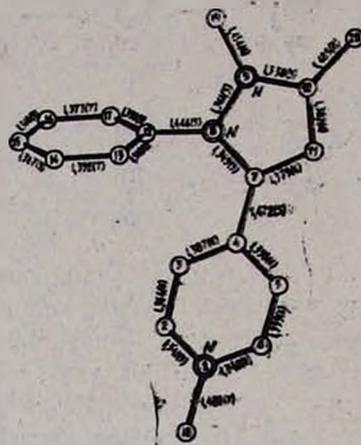


Рис. Строение катиона молекулы V с нумерацией атомов:

Валентные углы ω (σ) (град.)

Таблица I'

Угол	ω (σ)	Угол	ω (σ)
C(2) N(1) C(6)	119,9 (4)	C(4) C(7) N(8)	124,0 (3)
N(1) C(2) C(3)	121,1 (4)	C(4) C(7) C(11)	128,2 (4)
C(2) C(3) C(4)	120,1 (4)	C(7) N(8) C(12)	130,6 (3)
C(3) C(4) C(5)	117,5 (4)	N(9) N(8) C(12)	120,9 (3)
C(4) C(5) C(6)	120,3 (4)	N(8) N(9) C(19)	121,8 (3)
C(5) C(6) N(1)	120,9 (4)	C(10) N(9) C(19)	128,9 (4)
C(2) N(1) C(18)	120,9 (4)	N(9) C(10) C(20)	121,8 (4)
C(6) N(1) C(18)	119,1 (4)	C(11) C(10) C(20)	130,6 (5)
C(3) C(4) C(7)	124,3 (4)	C(12) C(13) C(14)	117,6 (4)
C(5) C(4) C(7)	118,2 (3)	C(13) C(14) C(15)	120,8 (5)
C(7) N(8) N(9)	108,2 (3)	C(14) C(15) C(16)	120,4 (6)
N(8) N(9) C(10)	109,2 (3)	C(15) C(16) C(17)	120,7 (5)
N(9) C(10) C(11)	107,5 (4)	C(16) C(17) C(12)	118,2 (5)
C(10) C(11) C(7)	107,3 (4)	C(17) C(12) C(13)	112,2 (4)
C(11) C(7) N(8)	106,3 (4)	N(8) C(12) C(13)	118,5 (4)
		N(8) C(12) C(17)	119,2 (4)

Полученные соли IV и V были восстановлены боргидридом натрия, приводя в итоге к одному и тому же продукту, а именно 1-фенил-3-метил-5-(1',2',5',6'-тетрагидро-4'-пиридил)пиразолу (VI). Восстановлением последнего в присутствии 10% палладия на угле была реализована искомая схема превращений для получения фенилпиперидилпиразолов.

Все полученные соединения переданы на биологические испытания по выявлению нейротропной активности.

Таблица 2

Плоские фрагменты катиона
а) Отклонение атомов Δ (Å) от среднеквадратичных плоскостей

Пло- скость I	Δ	Δ/σ	Пло- скость II	Δ	Δ/σ	Пло- скость III	Δ	Δ/σ
N (1)	0,022	6,3	C (7)	0,003	0,8	C (12)	0,004	1,0
C (2)	-0,020	4,5	N (8)	-0,003	0,9	C (13)	0,003	0,7
C (3)	-0,018	4,2	N (9)	0,003	0,9	C (14)	-0,009	1,7
C (4)	0,032	8,4	C (10)	-0,002	0,5	C (15)	0,001	0,1
C (5)	-0,027	6,1	C (11)	-0,001	0,3	C (16)	0,013	2,5
C (6)	-0,011	2,4	C (4)*	-0,112	28,7	C (17)	-0,014	2,9
C (7)*	0,138	36,2	C (12)*	0,109	26,9	N (8)*	-0,043	14,5
C (18)*	0,191	28,1	C (19)*	0,096	16,2			
			C (20)*	0,024	3,0			

б) Уравнение плоскостей $Ax + By + Cz - D = 0$
в ортогональной системе координат

Плоскость	A	B	C	D
I	-0,8397	-0,2718	-0,4701	-3,7617
II	-0,9899	-6,0256	-0,1392	-0,1915
III	-0,1810	-0,3914	0,9023	0,1783

в) Двугранные углы (град.) между плоскостями

Плоскости	Угол	Плоскости	Угол
I—II	25	II—III	107
I—III	118		

Испытания проводились на мышах. Для оценки противосудорожного действия применяли методику антагонизма с коразолом [9]. Эта модель служила одновременно прогностическим тестом для оценки транквилизирующего действия веществ [10]. Соединения вводились в виде взвеси с твин-80 внутривенно.

Установлено, что соединения V и VI в дозе 5 мг/кг предупреждают клонические коразоловые судороги у 40% мышей, что может свидетельствовать об их противосудорожных и транквилизирующих свойствах.

В той же дозе соединения IV и VII почти лишены подобных эффектов.

Экспериментальная часть

ИК спектры регистрировались на приборе UR-20, спектры ПМР—на спектрометре «Varian T-60» с использованием ТМС в качестве внутреннего стандарта, ТСХ проводилась на пластинках «Silufol UV-254», проявитель—пары йода.

Рентгеноструктурное исследование проведено на 4-кружном автоматическом дифрактометре «Хилгер-Уоттс» с использованием MoK_α -излучения (графитовый монохроматор).

Кристаллы V триклинные:

$a = 7,4747$ (5) Å	$V = 957,5$ (1) Å ³
$b = 10,2118$ (3)	$M = 519,19$
$c = 13,804$ (1)	$d_{\text{пл.ч}} = 1,80$ г/см ³
$\alpha = 107,192$ (4)°	$Z = 2$
$\beta = 93,278$ (6)	пространственная группа $P\bar{1}$
$\gamma = 105,809$ (4)	

Интенсивности 3278 независимых отражений в области $1^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$ измерены методом $\theta/2\theta$ -сканирования. В структурных расчетах, выполненных на ЭВМ «Эклипс S/200», по программам INEXTL [11] использовано 2870 отражений с $F^2 \geq 2\sigma$. Структура расшифрована методом тяжелого атома и уточнена методом наименьших квадратов в полноматричном анизотропном приближении. Атомы водорода, положения которых локализованы в разностном синтезе электронной плотности, включены в уточнение в изотропном приближении. Окончательные значения факторов расхожимости $R = 0,024$ и $R_w = 0,028$. Координаты атомов и параметры их температурных факторов приведены в табл. 3.

1-Фенил-3-метил-5-(4'-пиридил)пиразол (II). Смесь 3,3 г (0,02 моля) diketона I и 2,2 г (0,02 моля) фенилгидразина в 30 мл абс. толуола кипятят в колбе, снабженной насадкой Дина-Старка, до полного водоотделения. Отгоняют толуол, остаток кристаллизуют из гексана. Получают 4,4 г (94%) соединения II с т. пл. $73-74^\circ$ (из гексана), R_f 0,56 (метанол—эфир 1:2). Найдено %: C 76,32; H 5,39; N 18,04. $\text{C}_{15}\text{H}_{13}\text{N}_3$. Вычислено %: C 76,57; H 5,57; N 17,86. Спектр ПМР (в $\text{DMCO}-d_6$), δ , м. д.: 8,55 д ($J = 6$ Гц, 2H, 2'- и 6'-CH), 7,25—7,60 м (5H, C_6H_5), 7,17 д ($J = 6$ Гц, 2H, 3'- и 5'-CH), 6,65 с (1H, 4-CH), 2,30 с (3H, 3-CH₃).

Йодид 1-фенил-3-метил-5-(1'-метил-4'-пиридиний)пиразола (IV). Раствор 3,5 г (0,015 моля) фенилпиразола II и 12,0 г (0,08 моля) йодистого метила в 30 мл абс. ацетона или метанола оставляют на ночь при комнатной температуре. Выпавшие кристаллы отфильтровывают и промывают сухим эфиром. Получают 3,2 г (57%) IV с т. пл. $229-230^\circ$ (из метанола), R_f 0,42 (бутанол-вода-уксусная кислота, 7:2:1). Найдено %: I 34,02; N 10,96. $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{IN}_3$. Вычислено %: I 33,64; N 11,14. Спектр ПМР (в $\text{DMCO}-d_6$), δ , м. д.: δ , 93 д ($J = 6$ Гц, 2H, 2'- и 6'-CH),

Таблица 3

Координаты атомов $\times 10^4$ ($\times 10^3$ для атома I и $\times 10^3$ для атома H) и параметры температурных факторов*

Атом	x/a	y/b	z/c	B_{11}	B_{22}	B_{33}	B_{12}	B_{13}	B_{23}
I (1)	29351 (4)	37608 (3)	59582 (2)	4,16 (1)	3,32 (1)	4,86 (2)	1,71 (1)	0,64 (1)	1,00 (1)
I (2)	-17589 (4)	-7372 (3)	12874 (2)	3,95 (1)	4,81 (1)	3,57 (1)	1,72 (1)	0,62 (1)	1,21 (1)
N (1)	1625 (5)	7689 (3)	5790 (2)	4,0 (2)	2,9 (1)	2,9 (1)	1,3 (1)	0,1 (1)	0,8 (1)
C (2)	2269 (6)	6919 (4)	5000 (3)	4,7 (2)	2,6 (2)	2,9 (2)	1,7 (1)	-0,01 (1)	0,5 (1)
C (3)	2774 (6)	7420 (4)	4211 (3)	3,7 (2)	3,0 (2)	2,8 (2)	1,8 (1)	0,5 (1)	0,6 (1)
C (4)	2620 (5)	8745 (4)	4215 (3)	2,7 (2)	2,7 (1)	2,8 (1)	1,0 (1)	-0,1 (1)	0,6 (1)
C (5)	2085 (6)	9566 (4)	5079 (3)	4,0 (2)	2,6 (2)	8,2 (2)	1,4 (1)	0,3 (1)	0,5 (1)
C (6)	1573 (6)	9017 (4)	5842 (3)	5,0 (2)	3,2 (2)	2,8 (2)	2,0 (2)	0,9 (2)	0,6 (1)
C (7)	2993 (5)	9334 (4)	3368 (3)	2,5 (2)	2,6 (1)	3,1 (2)	0,9 (1)	0,0 (1)	0,7 (1)
N (8)	2849 (4)	8519 (3)	2382 (2)	3,0 (1)	2,4 (1)	2,7 (1)	0,9 (1)	0,3 (1)	0,7 (1)
N (9)	3214 (4)	9409 (3)	1805 (2)	2,8 (1)	2,9 (1)	3,2 (1)	0,7 (1)	0,3 (1)	1,2 (1)
C (10)	3606 (5)	10773 (4)	2415 (3)	2,9 (2)	2,9 (2)	4,0 (2)	0,6 (1)	-0,0 (1)	1,2 (1)
C (11)	3475 (6)	10752 (4)	3465 (3)	3,5 (2)	2,4 (2)	3,7 (2)	0,6 (1)	-0,1 (1)	0,6 (1)
C (12)	2234 (5)	6974 (4)	1907 (3)	3,4 (2)	2,4 (1)	2,7 (1)	0,8 (1)	0,2 (1)	0,5 (1)
C (13)	383 (6)	6241 (5)	1856 (3)	3,5 (2)	3,4 (2)	3,6 (2)	1,2 (2)	0,1 (1)	0,8 (1)
C (14)	-164 (8)	4748 (5)	1434 (4)	4,5 (2)	3,3 (2)	5,5 (3)	0,0 (2)	0,6 (2)	1,2 (2)
C (15)	1106 (9)	4052 (6)	1073 (4)	7,1 (3)	2,9 (2)	4,6 (2)	1,4 (2)	-0,9 (2)	0,1 (2)
C (16)	2935 (9)	4808 (5)	1124 (4)	6,3 (3)	3,9 (2)	4,9 (2)	3,0 (2)	0,9 (2)	0,6 (2)
C (17)	3547 (7)	6278 (5)	1560 (4)	4,3 (2)	3,7 (2)	4,4 (2)	1,7 (2)	1,3 (2)	1,1 (2)
C (18)	856 (10)	7069 (6)	6576 (4)	7,4 (3)	3,8 (2)	3,7 (2)	2,2 (2)	1,8 (2)	1,8 (2)
C (19)	3038 (8)	9853 (6)	692 (4)	3,9 (2)	4,4 (2)	3,3 (2)	1,0 (2)	0,4 (2)	1,3 (2)
C (20)	4035 (11)	11997 (6)	2002 (5)	6,6 (3)	3,7 (2)	5,4 (3)	0,7 (2)	0,3 (3)	2,2 (2)

Атом	x/a	y/b	z/c
H (2)	249 (6)	612 (5)	510 (3)
H (5)	202 (6)	10501 (5)	518 (3)
H (11)	357 (6)	1156 (6)	394 (3)
H (14)	134 (8)	435 (5)	139 (3)
H (16)	368 (7)	436 (3)	89 (4)
H (18A)	113 (8)	628 (7)	652 (4)
H (18C)	-44 (9)	658 (7)	635 (5)
H (19B)	213 (9)	800 (7)	44 (5)
H (20A)	290 (9)	1189 (7)	155 (5)
H (20C)	448 (9)	1285 (7)	258 (5)

* Анизотропный температурный фактор имеет вид:

Продолжение таблицы 3

<i>V</i> _{изо}	Атом	<i>x</i> ' <i>a</i>	<i>y</i> ' <i>b</i>	<i>z</i> ' <i>c</i>	<i>V</i> _{изо}
4 (1)	II (3)	320 (5)	698 (4)	378 (3)	2 (1)
4 (1)	H (6)	120 (5)	9 (4)	639 (3)	3 (1)
4 (1)	II (13)	424 (6)	671 (5)	205 (3)	4 (1)
5 (1)	H (15)	72 (8)	312 (7)	79 (5)	7 (2)
5 (1)	H (17)	464 (6)	680 (5)	160 (3)	4 (1)
6 (1)	H (18B)	105 (2)	787 (6)	728 (4)	6 (1)
8 (2)	H (19A)	262 (8)	943 (7)	50 (5)	7 (2)
7 (2)	H (19C)	428 (10)	893 (7)	47 (5)	8 (2)
9 (2)	H (20B)	501 (8)	119 (6)	171 (4)	6 (1)
8 (2)					

$$T = \exp \left[-1/4 (B_{11} h^2 a^{*2} + \dots - 2B_{23} k l b^* c^*) \right],$$

7,02 д ($J=6$ Гц, 2Н, 3'- и 5'-СН), 7,30—7,70 м (5Н, C_6H_5), 7,10 с (1Н, 4-СН), 4,35 с (3Н, 1'-СН₃), 2,37 с (3Н, 3-СН₃).

Дийодид 1-фенил-2,3-диметил-5-(1'-метил-4'-пиридиный)пиразолия (V). Смесь 2,4 г (0,01 моля) фенилпиразола II и 6,0 г (0,04 моля) йодистого метила кипятят в 30 мл метанола в запаянной ампуле 7—8 ч. Охлаждают, выпавшие кристаллы отфильтровывают и промывают метанолом. Получают 4,3 г (83%) V с т. пл. 241—242° (из спирта), R_f 0,33, (бутанол-вода-уксусная кислота, 7:2:1). Найдено %: I 48,52; N 7,85. $C_{17}H_{19}I_2N_3$. Вычислено %: I 48,89; N 8,09. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1530 (аром. кольцо пиразолия), 1570 (аром. кольцо пиридиния), 1620 (аром. кольцо бензола). Спектр ПМР (в ДМСО- d_6), δ , м. д.: 9,03 д ($J=6$ Гц, 2Н, 2'- и 6'-СН), 7,60—8,10 м (8Н, C_6H_5 , 4-СН, 3'- и 5'-СН), 4,23 с (3Н, 1'-СН₃), 3,70 с (3Н, 2-СН₃), 2,60 с (3Н, 3-СН₃). Масс-спектр, m/e : 235 (M^+-2CH_3I).

1-Фенил-3-метил-5-(1'-метил-1',2',5',6'-тетрагидро-4'-пиридил)пиразол (VI). К раствору 2 г (0,005 моля) четвертичной соли IV в 30 мл метанола добавляют по порциям 0,4 г (0,011 моля) боргидрида натрия так, чтобы температура реакционной смеси не превышала 30°. Смесь кипятят 2—3 ч, отгоняют метанол, остаток обрабатывают 40% раствором гидроксида натрия и экстрагируют сначала эфиром, затем хлороформом. После высушивания и удаления растворителей остаток перегоняют в вакууме. Получают 1,0 г (79%) VI с т. кип. 145—146°/2 мм в виде вязкой жидкости, R_f 0,52 (ДМФА). Найдено %: С 75,53; Н 7,70; N 16,32. $C_{16}H_{19}N_3$. Вычислено %: С 75,85; Н 7,56; N 16,59. Спектр ПМР (в CCl_4), δ , м. д.: 7,50 с (5Н, C_6H_5), 6,56 с (1Н, 4-СН), 5,85 м (1Н, 3'-СН), 2,80—3,10 м (2Н, 2'-СН₂), 2,64 с (3Н, 1'-СН₃), 2,30—2,55 м (4Н, 5'- и 6'-СН₂), 2,26 с (3Н, 3-СН₃). Т. пл. гидрохлорида 225—226° (из ацетона). Найдено %: Cl 12,57; $C_{16}H_{19}N_3 \cdot HCl$. Вычислено %: Cl 12,26.

Аналогично из 2,6 г (0,005 моля) дичетвертичной соли V и 0,4 г (0,011 моля) боргидрида натрия получено 0,9 г (75%) VI.

1-Фенил-3-метил-5-(1'-метил-4'-пиперидил)пиразол (VII). В смесь 1,2 г (0,004 моля) гидрохлорида VI, 0,7 г 10% палладия на угле и 30 мл абс. метанола пропускают ток водорода до прекращения его поглощения. Осадок отфильтровывают, удаляют метанол. Получают 0,85 г (83%) VII с т. пл. 131—132° (из гексана), R_f 0,41 (ДМФА). Найдено %: С 75,47; Н 8,54; N 16,30. $C_{16}H_{21}N_3$. Вычислено %: С 75,25; Н 8,29; N 16,46. Спектр ПМР (в ДМСО- d_6), δ , м. д.: 7,30 с (5Н, C_6H_5), 5,93 с (1Н, 4-СН), 2,50—2,75 м (9Н, 2'-, 3'-, 5'-, 6'-СН₂, 4'-СН), 2,10 с (3Н, 1'-СН₃), 1,95 с (3Н, 3-СН₃). Масс-спектр, m/e : 255 (M^+). Т. пл. гидрохлорида 179—180° (из ацетона). Найдено %: Cl 12,43. $C_{16}H_{21}N_3 \cdot HCl$. Вычислено %: Cl 12,18.

1-Ֆենիլ-3-Մեթիլ-5-(1'-Մեթիլ-4'-Գիթերիդիլ)Գիբազոլի ՍԻՆԹԵԶԸ
1-Ֆենիլ-2,3-Դիմեթիլ-5-(1'-Մեթիլ-4'-Գիթերիդիլ)Գիբազոլի ՈՒՄՄ
ԴԻՅՈՂԻԿԻ ԲՅՈՒՐԵՂԱԿԱՆ ԵՎ ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔԸ

Ռ. Ս. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Ռ. Ս. ՇԱՀԻՆՅԱՆ, Ժ. Վ. ՂԱԶԱՐՅԱՆ,
Հ. Ա. ԿԱՐԱՊԵՏՅԱՆ Ե ՅՈՒ. Տ. ՍՏՐՈՒՉԿՈՎ

Իրականացված է 1-ֆենիլ-3-մեթիլ-5-(1'-մեթիլ-4'-պիպերիդիլ) պիբազոլի սինթեզը համապատասխան պիրիդիլպիրազոլի վերականգնմամբ: Իրականացված է 1-ֆենիլ-2,3-դիմեթիլ-5-(1'-մեթիլ-4'-պիրիդինիում) պիրազոլիումի դիյոդիդի սինթեզի սկզբնական ուղղվածքային հետազոտումը:

THE SYNTHESIS OF 1-PHENYL-3-METHYL-5-(1'-METHYL-4'-PIPERIDYL)PYRAZOLE. THE CRYSTALLINE AND MOLECULAR STRUCTURE OF 1-PHENYL-2,3-DIMETHYL-5-(1'-METHYL-4'-PYRIDINIUM)PYRAZOLIUM DIIODIDE

R. S. VARTANIAN, R. S. SHAHINIAN, Zh. V. GHAZARIAN,
H. A. KARAPETIAN and Yu. T. STRUCHKOV

The title piperidylpyrazole has been synthesised by reduction of corresponding pyridylpyrazole and has been tested for neurotropic activity. The X-ray analysis of 1-phenyl-2,3-dimethyl-5-(1'-methyl-4'-pyridinium)pyrazolium diiodide single crystal has been carried out.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Вартанян Р. С., Казарян Ж. В., Вартанян С. А. — ХГС, 1979, № 3, с. 309.
2. Вартанян Р. С., Казарян Ж. В., Вартанян С. А. — Арм. хим. ж.—1980, т. 33, № 3, с. 224.
3. Вартанян Р. С., Шагинян Р. С., Вартанян С. А. — Арм. хим. ж., 1982, т. 35, № 7, с. 472.
4. Faulstich L. — Farmaco. Ed. Sci., 1954, vol. 9, № 7, p. 603.
5. La Cour T., Rasmussen S. E. — Acta Chem. Scand., 1973, vol. 27, № 6. p. 1845.
6. Китайгородский А. И., Зоркий П. М., Бельский В. К. — Строение органического вещества. Данные структурных исследований, 1971—1973. М., Наука, 1982.
7. Sutton L. E. — Tables of Interatomic Distances and Configurations in Molecules and Ions, London, Chemical Society, 1965, p. 288.
8. Pauling L. — Nature of the Chemical Bonds, 1st-ed edition, New-York, Ithaca, Cornell University Press, 1960, p. 644.
9. Swinyard E., Brown W., Goodmen J. — J. Pharmacol. and Exptl. Therap., 1952, vol. 106, № 3, p 319.
10. Выхляев Ю. В., Клягуль Т. А. Фармакология транквилизаторов производных 1,4-бензодиазепина. Успехи в создании новых лекарственных средств, М., Медицина, 1973, стр. 70.
11. Герр Р. Г., Яновский А. И., Стручков Ю. Т. — Кристаллография, 1983, т. 28, № 9, с. 1029.