

СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ 4-МЕТИЛ-2,2-ДИОКСО-1*H*-2λ⁶,1-БЕНЗОТИАЗИН-3-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

И.В. Украинец, В.А. Паришков*

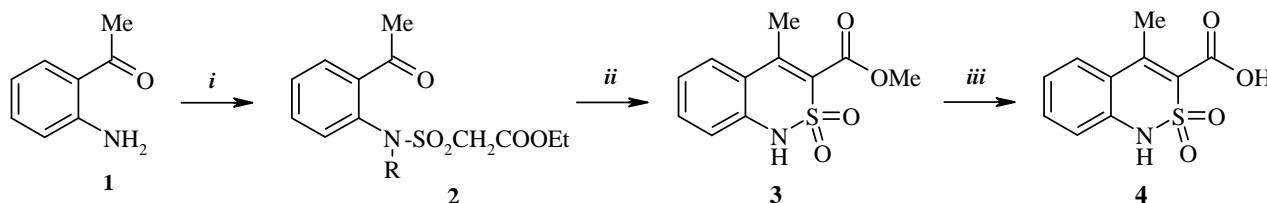
Национальный фармацевтический университет,

Украина, 61168, Харьков, ул. Блюхера, 4

E-mail: uiv@kharkov.ua

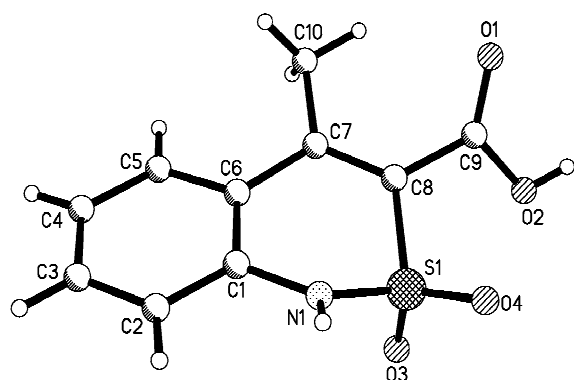
*Крымский государственный медицинский университет им. С.И. Георгиевского
Украина, 95006, Симферополь, бульвар Ленина, 5/7

В продолжение проводимых нами широких исследований по поиску новых биологически активных веществ среди хинолин-2-онов и их 2-сульфоаналогов (сульфостирилов), в качестве основы для последующих химических превращений по приведенной ниже схеме осуществлен синтез 4-метил-2,2-диоксо-1*H*-2λ⁶,1-бензотиазин-3-карбоновой кислоты:



i ClSO₂CH₂COOEt; *ii* MeONa, MeOH; *iii* NaOH, H₂O

С помощью рентгеноструктурного анализа найдено, что дигидротиазиновый цикл кислоты **4** находится в конформации, промежуточной между *твист-ванной* и *софой* (см. рис.). Отклонения атомов S(1) и C(8) от среднеквадратичной плоскости остальных атомов цикла составляют 0.82 и 0.25 Å соответственно. Атом азота имеет планарную конфигурацию, сумма валентных углов, центрированных на нем, составляет 360°. Карбоксильный заместитель



развернут относительно эндоциклической двойной связи C(7)-C(8), несмотря на ВМВС C(10)-H...O(1). В молекуле кислоты **4** обнаружено стерическое отталкивание между метильной группой и атомами ароматического цикла (укороченные внутримолекулярные контакты H(5)...C(10) 2.57 Å и H(10c)...C(5) 2.79 Å при сумме вандерваальсовых радиусов 2.87 Å).

При проведении дальнейших синтетических исследований на основе 4-метил-2,2-диоксо-1*H*-2λ⁶,1-бензотиазин-3-карбоновой кислоты **4** следует обращать особое внимание на то, что в кристаллической фазе это соединение способно легко образовывать достаточно устойчивый моногидрат, в котором молекулы кислоты **4** и воды связаны несколькими ММВС: N(1)-H...O(1w)'; O(2)-H...O(1w); O(1w)-H(1wa)...O(1)' и O(1w)-H(1wb)...O(3)'.