

## 8 Publikationsverzeichnis

### Postervorträge

Werner Löwe, Astrid Lumetzberger und Christoph Dietrich

**"Synthesis of (Z)-3-[(4-Oxo-1H-pyridine-2-yl)methylidenyl]indolin-2-one"**

18<sup>th</sup> International Congress of Heterocyclic Chemistry,  
29. Juli-03. August 2001, Yokohama, Japan

Tag der Chemie, 07. November 2001, Berlin

### Veröffentlichungen

A. Lumetzberger, W. Löwe und C. Dietrich

**"Synthesis of Pyridonmethyliden substituted Indolin-2-one"**

Journal of Heterocyclic Chemistry,

*Publikation in Vorbereitung*

A. Lumetzberger, W. Löwe und C. Dietrich

**"Synthesis of Pyridonmethyliden substituted Indolin-2-one with polar substitution at the pyridone ring"**

Journal of Heterocyclic Chemistry,

*Publikation in Vorbereitung*

## Röntgenstrukturdaten von 18

Formel	$C_{14}H_9NO_3$
Molekulargewicht	239.22
Temperatur	293 (2) K
Wellenlänge	1.54180 Å
Kristallsystem	monoklinisch
Raumgruppe	C2/c
Gitterkonstanten	a = 20.780(9) Å b = 6.323(3) Å c = 20.931(6) Å $\alpha = 90.00(3)^\circ$ $\beta = 125.87(3)^\circ$ $\gamma = 90.00(4)^\circ$
Zellvolumen	2228.6(16) Å <sup>3</sup>
Z	8
Dichte $\rho$ (berechnet)	1.426 Mg/m <sup>3</sup>
Absorptionskoeffizient $\mu$	0.843 mm <sup>-1</sup>
F(000)	992
Kristallabmessungen	0.44 x 0.26 x 0.08 mm
$\Theta$ - Bereich der Datenerfassung	4.76 bis 65.02°
$h, k, l$ - Grenzen	-24 ≤ h ≤ 24, 0 ≤ k ≤ 7, -24 ≤ l ≤ 24
Gemessene Reflexzahl	3817
Verfeinerungsmethode	Full-matrix least-squares bzgl. $F^2$
Goodness-of-fit bzgl. $F^2$	1.044 < 41
Endgültige $R$ -Werte [ $ I < 2\sigma(I) $ ]	R1 = 0.0313, wR2 = 0.0852
$R$ -Werte (alle Daten)	R1 = 0.0460, wR2 = 0.0921
Extinktionskoeffizient	0.00128 (14)
Größtes Differenzdichtemaximum und -minimum	0.130 and -0.143 eÅ <sup>-3</sup>

**Tab. 1:** Kristalldaten und Strukturverfeinerung von 18

	x	y	z	U (eq)
C(1)	3877(1)	3514(2)	808(1)	51(1)
C(2)	4256(1)	4934(3)	1432(1)	60(1)
C(3)	4639(1)	6673(3)	1402(1)	68(1)
C(4)	4646(1)	7036(3)	752(1)	70(1)
C(5)	4273(1)	5661(3)	123(1)	65(1)
C(6)	3901(1)	3921(2)	160(1)	54(1)
N(7)	3498(1)	2341(2)	-405(1)	61(1)
C(8)	3191(1)	881(2)	-179(1)	55(1)
O(8)	2802(1)	-651(2)	-554(1)	70(1)
C(9)	3432(1)	1559(2)	632(1)	50(1)
C(10)	3213(1)	271(3)	983(1)	53(1)
C(11)	3340(1)	382(2)	1744(1)	52(1)
C(12)	3203(1)	-1246(2)	2056(1)	53(1)
C(13)	3355(1)	-1107(2)	2824(1)	53(1)
O(13)	3273(1)	-2628(2)	3140(1)	69(1)
C(14)	3615(1)	939(3)	3181(1)	64(1)
C(15)	3723(1)	2482(3)	2828(1)	74(1)
O(16)	3607(1)	2267(2)	2121(1)	69(1)

**Tab. 2:** Atomkoordinaten ( $\times 10^4$ ) und äquivalente isotrope Verschiebungsparameter ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) von **18** ( $U_{\text{eq}} = 1/3 \sum_i \sum_j U_{ij} a_i^* a_j^* a_i^* a_j^*$ )

C(1)-C(2)	1.389(2)
C(1)-C(6)	1.4101(19)
C(1)-C(9)	1.456(2)
C(2)-C(3)	1.380(2)
C(2)-H(2)	0.967(17)
C(3)-C(4)	1.387(3)
C(3)-H(3)	1.006(19)
C(4)-C(5)	1.377(3)
C(4)-H(4)	1.002(19)
C(5)-C(6)	1.373(2)
C(5)-H(5)	0.96(2)
C(6)-N(7)	1.391(2)
N(7)-C(8)	1.356(2)
N(7)-H(7)	0.88(2)
C(8)-O(8)	1.210(2)
C(8)-C(9)	1.5231(19)
C(9)-C(10)	1.341(2)
C(10)-C(11)	1.4558(18)
C(10)-H(10)	0.972(16)
C(11)-C(12)	1.337(2)
C(11)-O(16)	1.3557(19)
C(12)-C(13)	1.448(2)
C(12)-H(12)	0.969(16)
C(13)-O(13)	1.2343(18)
C(13)-C(14)	1.432(2)
C(14)-C(15)	1.318(2)
C(14)-H(14)	0.94(2)
C(15)-O(16)	1.3623(19)
C(15)-H(15)	0.96(2)

**Tab. 3:** Bindungslängen (Å) von **18**

C(2)-C(1)-C(6)	117.80(15)
C(2)-C(1)-C(9)	135.49(13)
C(6)-C(1)-C(9)	106.71(13)
C(3)-C(2)-C(1)	119.83(15)
C(3)-C(2)-H(2)	122.2(10)
C(1)-C(2)-H(2)	117.9(10)
C(2)-C(3)-C(4)	120.90(18)
C(2)-C(3)-H(3)	120.3(11)
C(4)-C(3)-H(3)	118.8(11)
C(5)-C(4)-C(3)	120.68(18)
C(5)-C(4)-H(4)	118.1(11)
C(3)-C(4)-H(4)	121.2(11)
C(6)-C(5)-C(4)	118.19(15)
C(6)-C(5)-H(5)	120.1(11)
C(4)-C(5)-H(5)	121.7(11)
C(5)-C(6)-N(7)	127.31(14)
C(5)-C(6)-C(1)	122.60(15)
N(7)-C(6)-C(1)	110.09(14)
C(8)-N(7)-C(6)	111.35(13)
C(8)-N(7)-H(7)	124.1(12)
C(6)-N(7)-H(7)	124.4(12)
O(8)-C(8)-N(7)	126.16(13)
O(8)-C(8)-C(9)	127.42(14)
N(7)-C(8)-C(9)	106.42(14)
C(10)-C(9)-C(1)	138.28(13)
C(10)-C(9)-C(8)	116.27(14)
C(1)-C(9)-C(8)	105.42(12)
C(9)-C(10)-C(11)	131.82(15)
C(9)-C(10)-H(10)	116.6(9)
C(11)-C(10)-H(10)	111.5(9)
C(12)-C(11)-O(16)	121.66(13)
C(12)-C(11)-C(10)	122.94(15)
O(16)-C(11)-C(10)	115.40(13)
C(11)-C(12)-C(13)	121.71(14)
C(11)-C(12)-H(12)	118.1(10)
C(13)-C(12)-H(12)	120.2(10)
O(13)-C(13)-C(14)	123.57(13)
O(13)-C(13)-C(12)	122.60(14)
C(14)-C(13)-C(12)	113.83(13)
C(15)-C(14)-C(13)	120.83(14)
C(15)-C(14)-H(14)	117.7(12)
C(13)-C(14)-H(14)	121.4(12)
C(14)-C(15)-O(16)	123.74(16)
C(14)-C(15)-H(15)	127.0(13)
O(16)-C(15)-H(15)	109.2(13)
C(11)-O(16)-C(15)	118.13

**Tab. 4:** Bindungswinkel (°) von **18**

	<b>u11</b>	<b>u22</b>	<b>u33</b>	<b>u23</b>	<b>u13</b>	<b>u12</b>
C(1)	57(1)	60(1)	41(1)	5(1)	31(1)	9(1)
C(2)	68(1)	69(1)	48(1)	-2(1)	36(1)	-1(1)
C(3)	71(1)	70(1)	62(1)	-5(1)	38(1)	-7(1)
C(4)	67(1)	72(1)	73(1)	10(1)	42(1)	-1(1)
C(5)	71(1)	75(1)	60(1)	16(1)	45(1)	11(1)
C(6)	61(1)	62(1)	46(1)	7(1)	36(1)	11(1)
N(7)	84(1)	71(1)	43(1)	4(1)	45(1)	6(1)
C(8)	71(1)	62(1)	40(1)	1(1)	36(1)	8(1)
O(8)	99(1)	69(1)	48(1)	-10(1)	47(1)	-6(1)
C(9)	62(1)	55(1)	37(1)	2(1)	31(1)	8(1)
C(10)	70(1)	55(1)	40(1)	0(1)	35(1)	3(1)
C(11)	66(1)	53(1)	41(1)	-2(1)	34(1)	3(1)
C(12)	72(1)	54(1)	41(1)	-4(1)	37(1)	-2(1)
C(13)	68(1)	57(1)	41(1)	-1(1)	36(1)	0(1)
O(13)	107(1)	63(1)	52(1)	-2(1)	55(1)	-10(1)
C(14)	95(1)	64(1)	45(1)	-8(1)	48(1)	-4(1)
C(15)	122(2)	61(1)	59(1)	-14(1)	64(1)	-12(1)
O(16)	115(1)	56(1)	55(1)	-7(1)	61(1)	-10(1)

**Tab. 5:** Anisotrope Verschiebungsparameter ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) von **18**. Der Exponent des anisotropen Verschiebungsfaktors hat die Formel:  $-2\pi^2(h^2a^{*2}U_{11}+\dots+2hka^*b^*U_{12})$

	<b>x</b>	<b>y</b>	<b>z</b>	<b>U(eq)</b>
H(2)	4245(9)	4650(30)	1879(10)	70(5)
H(3)	4911(11)	7720(30)	1850(11)	81(6)
H(4)	4907(11)	8320(30)	720(11)	78(5)
H(5)	4268(11)	5900(30)	-335(12)	79(5)
H(7)	3421(11)	2340(30)	-867(13)	81(6)
H(10)	2931(9)	-1010(20)	699(9)	54(4)
(H12)	3004(10)	-2550(30)	1756(10)	63(5)
H(14)	3697(11)	1240(30)	3661(12)	82(6)
H(15)	3903(13)	3900(30)	3023(13)	95(6)

**Tab. 6:** Wasserstoffkoordinaten ( $\times 10^4$ ) und isotrope Verschiebungsparameter ( $\text{\AA}^2 \times 10^3$ ) von **18**

C(6)-C(1)-C(2)-C(3)	0.0(2)
C(9)-C(1)-C(2)-C(3)	179.42(16)
C(1)-C(2)-C(3)-C(4)	0.5(3)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	-0.3(3)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-0.4(3)
C(4)-C(5)-C(6)-N(7)	-179.44(16)
C(4)-C(5)-C(6)-C(1)	1.0(2)
C(2)-C(1)-C(6)-C(5)	-0.8(2)
C(9)-C(1)-C(6)-C(5)	179.65(13)
C(2)-C(1)-C(6)-N(7)	179.57(13)
C(9)-C(1)-C(6)-N(7)	0.03(16)
C(5)-C(6)-N(7)-C(8)	-178.84(15)
C(1)-C(6)-N(7)-C(8)	0.76(18)
C(6)-N(7)-C(8)-O(8)	178.85(15)
C(6)-N(7)-C(8)-C(9)	-1.17(17)
C(2)-C(1)-C(9)-C(10)	-2.1(3)
C(6)-C(81)-C(9)-C(10)	177.34(18)
C(2)-C(1)-C(9)-C(8)	179.88(17)
C(86)-C(1)-C(89)-C(8)	-0.70(15)
O(8)-C(8)-C(9)-C(10)	2.6(2)
N(7)-C(8)-C(9)-C(10)	-177.40(13)
O(8)-C(8)-C(9)-C(1)	-178.88(15)
N(7)-C(8)-C(9)-C(1)	1.14(15)
C(1)-C(9)-C(10)-C(11)	1.5(3)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	179.36(15)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	-167.36(16)
C(9)-C(10)-C(11)-O(16)	12.9(2)
O(16)-C(11)-C(12)-C(13)	-1.9(2)
C(10)-C(11)-C(12)-C(13)	178.34(14)
C(11)-C(12)-C(13)-O(13)	-175.92(15)
C(11)-C(12)-C(13)-C(14)	3.4(2)
O(13)-C(13)-C(14)-C(15)	177.20(18)
C(12)-C(13)-C(14)-C(15)	-2.1(3)
C(13)-C(14)-C(15)-C(16)	-0.7(3)
C(12)-C(11)-O(16)-C(15)	-1.1(2)
C(10)-C(11)-O(16)-C(15)	178.72(12)
C(14)-C(15)-O(16)-C(11)	2.4(3)

**Tab. 7:** Torsionswinkel (°) von **18**



## Lebenslauf

### PERSÖNLICHE ANGABEN

---

Name	Astrid Lumetzberger
Geburtstag	24. September 1975
Geburtsort	Moers
Staatsangehörigkeit	österreichisch

### AUSBILDUNG

---

1981-1985	Grundschule Moers-Hülsdonk
1985-1993	Gymnasium Adolfinum, Moers
Juni 1993	Allgemeine Hochschulreife
1993-1994	Beginn des Pharmaziestudiums an der Universität Wien
1994-1998	Pharmaziestudium an der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn
Juni 1999	Approbation als Apothekerin
1999-2000	Diplom-Studiengang Pharmazie an der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Anfertigung der Diplomarbeit am Institut für Pharmazeutische Chemie, Universität Madrid unter der Leitung von Prof. Dr. C. Müller
Mai 2000	Abschluss als Diplom-Pharmazeutin
seit April 2000	Dissertation im Fach Pharmazeutische Chemie am Institut für Pharmazie der Freien Universität Berlin unter Anleitung von Prof. Dr. W. Löwe

### BERUFSERFAHRUNG

---

1998	Pharmaziepraktikum in der Jungfernstieg Apotheke, Hamburg
1998-1999	Pharmaziepraktikum bei der Bayer AG im Bereich Forschung und Entwicklung, Flüssige Arzneiformen, Leverkusen
seit April 2000	Teilzeittätigkeit in der Apotheke Charlottenburg Nord, Berlin
seit April 2000	Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Institut für Pharmazie der Freien Universität Berlin
seit April 2000	Lehraufträge am Institut für Pharmazie der Freien Universität Berlin