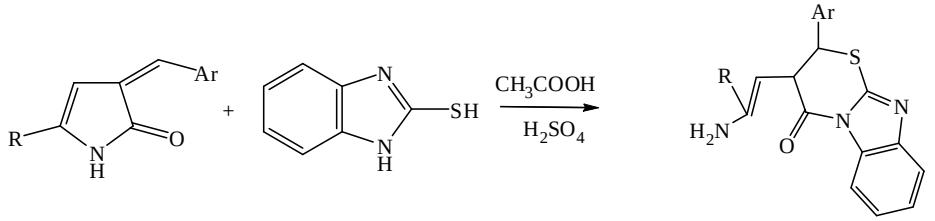
5-АРИЛ-3-АРИЛМЕТИЛЕН-3Н-ПИРРОЛ-2-ОНЫ В РЕАКЦИЯХ С 2-АМИНОБЕНЗИМИДАЗОЛОМ

Бурухина О.В., Аниськова Т.В., Егорова А.Ю.

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского
410012, г. Саратов, ул. Астраханская 83, корп.1, Институт химии

3-Арилметилиден-3Н-пиррол-2-оны, обладающие широким спектром биологической активности, занимают важное место среди органических соединений. С целью синтеза новых потенциально физиологически активных веществ актуальна структурная модификация их производных.

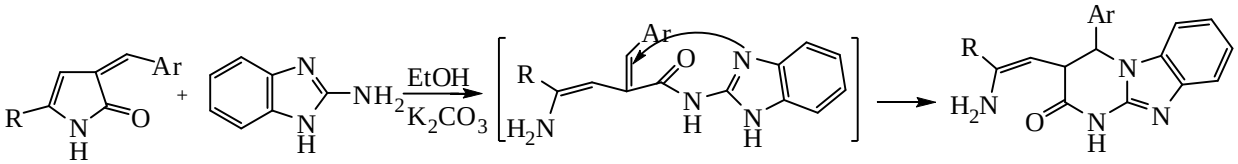
Ранее нами сообщалось о реакциях 5-R-3-арилметилиден-3Н-пиррол-2-онов с таким бинуклеофильным реагентом как 2-меркаптобензимидазол, приводящих к гетероциклам ряда тиазинонов ангулярного строения [1].



В связи с тем, что соединения, содержащие фрагмент бензимидазола, интересны благодаря разнообразной биологической активности, в настоящей работе в качестве бинуклеофильного реагента использовали 2-аминобензимидазол, имеющий в структуре два неравноценных по нуклеофильности атома азота.

Реакция 5-R-3-арилметилиден-3Н-пиррол-2-онов с 2-аминобензимидазолом проводилась при кипячении реагентов в этиловом спирте в течение 10 часов в условиях основного катализа (в качестве катализатора использовался поташ) при соотношении реагентов 1:1,5, соответственно.

Наличие второго нуклеофильного центра в реагенте определяет возможность взаимодействия по нескольким реакционным центрам, содержащихся в молекуле субстрата.



1a-c **2a-c**

1a, 2a Ar=Ph, R=Ph; **1b, 2 b** Ar=2-Cl-C_2H_4, R= Tol; **1c, 2c** Ar= 4-$N(CH_3)_2$-C_2H_4, R=Ph.

Данные элементного анализа и спектральные характеристики позволяют сделать вывод о строении полученных соединений в виде 3-(2-амино-2-арилвинил)-4-арил-3,4-дигидробензо[4,5]имидазо[1,2-а]пиримидин-2(1Н)-онов (**2 а-с)**. Продукты реакции **2а-с** выделены с выходом до 81%.

В ИК-спектрах соединения **2 а-с** отмечены полосы поглощения амидной карбонильной группы при 1683-1628 $см^{-1}$ (амидI), полоса «амидII» при 1577-1529 $см^{-1}$, колебания ароматических колец 1606-1598 $см^{-1}$, две полосы поглощения первичной амино-группы в интервале 3465-3212 $см^{-1}$. В ЯМР^{1}Н-спектрах соединений 2 **а-с** отмечены дублеты винильного протона в области 6,33-6,67 м.д. и протона при третичном атоме углерода в области 5,10-5,78 м.д., мультиплет протона при третичном атоме углерода расположен в области 3,50-3,79 м.д., синглет протонов NH_2 группы отмечен при 8,34-8,46 м.д., синглет NH

группы при 4,01-4,37 м.д., сигналы ароматических колец отмечены в областях 6,82-8,11 м.д., также отмечены синглеты метильной группы для соединения **2b** при 2,39 м.д., группы – $N(CH_3)_2$ соединения **2c** при 3,05 м.д. В спектрах ЯМР^{13}С соединения **2c** в сильном поле отмечены сигналы sp^3-гибридных атомов углерода при 31,88; 32,92 м.д., сигнал метильных групп фрагмента $–N(CH_3)_2$ при 39,99 м.д., сигналы атомов углерода енаминового фрагмента при 98,63 м.д. и при 151,29 м.д. (углерод, связанный с аминогруппой), сигнал карбонильной группы отмечен при 171,89 м.д., серия сигналов ароматических атомов углерода находятся в области 110,69-141,41 м.д.

Схема реакции предполагает первоначальную атаку нуклеофильного центра 2-аминобензимидазола по карбонильной группе пиррол-2-онового фрагмента, что сопровождается раскрытием гетероцикла.

Таким образом, в результате реакции 5-R-3-арилметилиден-3Н-пиррол-2-онов с 2-аминобензимидазолом получены новые полигетероциклические соединения – замещенные имидазопиримидиноны линеарного строения.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК - спектры записаны на приборе ИК фурье-спектрометре ФСМ-1201 в таблетках KBr, спектральный диапазон – 400-4000 см$^{-1}$. Спектры ЯМР^{1}Н получены на спектрометре Varian-400, при 20-25^{0}С в $CDCl_3$, внутренний стандарт ТМС. Рабочая частота 400 МГц. Спектры ЯМР^{1}Н получены на спектрометре Varian-400, при 20-25^{0}С в $CDCl_3$, внутренний стандарт ТМС. Рабочая частота 100 МГц.

3-(2-Амино-2-арилвинил)-4-арил-3,4-дигидробензо[4,5]имидазо[1,2-а]пиримидин-2(1Н)-оны 2 а-с. Смесь 0.010 моль 5-R-3-арилметилиден-3Н-пиррол-2-она (1а-с) и 0.015 моль 2-аминобензимидазола кипятят в этиловом спирте в течение 10 часов, с каталитическим количеством карбоната калия, выливают в холодную воду, нейтрализуют раствором соляной кислоты. Выпавшие кристаллы отфильтровывают, перекристаллизовывают из этилового спирта.

2а: Выход: 77 %, $T_{пл}$°С 99-97°С. Найдено: С, 75.21; Н, 5.00; N, 15.03;. C_{24} H_{20} N_4O. Вычислено С, 75.77; Н, 5.30; N, 14.73. ЯМР^{1}Н (400 MHz, $CDCl_3$): δ 6,41-6,45 (д, 1Н, =СН); 5,75-5,78 (д, 1Н, СН); 3,53-3,70 (м, 1Н, СН); 8,34 (с, 2Н,NH2), 4,01 (с, 1Н, NH), 6,97-7,91(м, 14Н, Ar).

2b: Выход: 81 %, $T_{пл}$°С 224-225°С. Найдено: С, 69.58; Н, 4.78; N, 13.31;. $C_{25}H_{21}ClN_4O$. Вычислено С, 70.01; Н, 4.90; N, 13.06. ЯМР^{1}Н (400 MHz, $CDCl_3$): δ 6,33-6,35 (д, 1Н, =СН); 5,26-5,29 (д, 1Н, СН); 3,51-3,69 (м, 1Н, СН); 8,46 (с, 2Н, NH2); 4,37 (с, 1Н, NH); 6,82-7,94 (м, 12 Н, Ar); 2,39 (с, 3Н, СН3).

2c: Выход: 68 %, $T_{пл}$°С 151-152°С. Найдено: С, 73.70; Н, 5.55; N, 16.03;. C_{26} H_{25} N_5O. Вычислено С, 73.74; Н, 5.95; N, 16.54. ЯМР^{1}Н (400 MHz, $CDCl_3$): δ 6,65-6,67 (д, 1Н, =СН); 5,10-5,12(д, 1Н, СН); 3,50-3,60 (м, 1Н, СН); 8,41(с, 2Н, NH2); 4,10 (с, 1Н, NH); 6,97-8,05 (м,13Н,Ar); 3,05 (с, 6Н, N(CH3)2).. ЯМР^{13}С (100 MHz, $CDCl_3$): δ 31,88; 32,92; 39,99; 98, 63; 110,69-141,41; 151,29; 153,50; 171,89

Литература

1. O.V. Burukhina, T.V. Anis'kova and A.Yu. Yegorova. //European Journal Of Natural History, 2011. №2. P. 52-53.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Грант 10-03-00640- а) и гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых №МК-2054.2011.3.