

УДК 547.82;547.789;548.737

## СИНТЕЗ И СТРУКТУРА БРОМИДОВ N-АРОИЛМЕТИЛ-2-(4-АРИЛТИАЗОЛ-2-ИЛ)ПИРИДИНИЯ

Г.Е.Хорошилов, Ю.В.Яроцкий, В.С.Броварец\*, А.Н.Чернега\*\*

Луганский национальный университет им. Тараса Шевченко  
91011, Украина, г. Луганск, ул. Оборонная, 2. E-mail: khoroshilov@inbox.ru

\* Институт биоорганической химии и нефтехимии НАН Украины

\*\* Институт органической химии НАН Украины

**Ключевые слова:** 2-тиокарбамоилтиридин; тиазолы Ганча; кватернизация; соли пиридиния

**При нагревании 2-(4-арил-1,3-тиазол-2-ил)пиридинов с ароилметилбромидами без растворителя получены соли N-ароилметил-2-(4-арилтиазол-2-ил)пиридinium, строение которых доказано при помощи рентгеноструктурного анализа.**

**THE SYNTHESIS AND THE STRUCTURE OF N-AROYLMETHYL-2-(4-ARYLTHIAZOL-2-YL)PYRIDINIUM BROMIDES**

**G.Ye.Khoroshilov, Yu.V.Yarotsky, V.S.Brovarets, O.M.Chernega**

**Heating 2-(4-aryl-1,3-thiazole-2-yl)pyridines with aroylmethyl bromides without a solvent results in formation of quaternary salts of N-aroylmethyl-2-(4-arylthiazol-2-yl)pyridinium, their structure has been proven by means of X-rays structural analysis.**

**СИНТЕЗ ТА БУДОВА БРОМІДІВ N-АРОЇЛМЕТИЛ-2-(4-АРИЛТИАЗОЛ-2-ІЛ)ПІРИДИНЮ**

**Г.Є.Хорошилов, Ю.В.Яроцький, В.С.Броварець, О.М.Чернега**

**При нагріванні 2-(4-арил-1,3-тиазол-2-іл)піридинів з ароїлметилбромідами без розчинника отримані солі N-ароїлметил-2-(4-арилтиазол-2-іл)піридинію, будову яких доведено за допомогою рентгеноструктурного аналізу.**

Ранее [1] нами был разработан стереоселективный синтез (*E*)-2-[1-метилпиридин-2(1Н)-илиден]-2-(4-арилтиазол-2-ил)ацетонитрилов конденсацией N-алкил-2-хлорпиридиниевых солей с 2-(2-тиазолил)ацетонитрилами. На селективность этой реакции, по-видимому, оказывает влияние внутримолекулярная водородная связь (BMBC) между атомом азота тиазольного фрагмента и атомом водорода H-3 пирдинового кольца с образованием шестизвездного цикла. В качестве доказательства BMBC в таких молекулах мы использовали данные спектроскопии ЯМР  $^1\text{H}$  (заметное смещение сигнала H-3 в слабое поле) [2].

Целью данной работы являлось решение двух задач. Во-первых, мы попытались выяснить возможность образования BMBC в аналогичной системе, не содержащей фиксированной кратной связи и формирующей пятизвенный цикл. Во-вторых, сохраняется ли BMBC при резком обеднении электронной плотности в пирдиновом цикле после кватернизации атома азота пирдинового кольца.

В литературе мы не нашли описания спектров ЯМР  $^1\text{H}$  интересующих нас систем [3] и поэтому, исходя из ранее полученного по простой методике [4] 2-тиокарбамоилпирдинина 1 и  $\omega$ -бромацетофенонов 2, был получен ряд тиазолов Ганча 3.

В спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  пирдинового цикла соединений 3 протоны H-3 проявляются в виде дублета с КССВ 7,86-7,89 Гц в области ~8,25 м.д., сигналы

протонов H-5 проявляются в более сильном поле ~7,40 м.д. Эти данные хорошо согласуются с результатами, полученными ранее [1, 5] и укладываются в концепцию образования BMBC (схема 1).

Дополнительным доказательством образования BMBC между атомом азота тиазольного фрагмента и H-3 пирдинового кольца может служить сравнение ЯМР  $^1\text{H}$  спектров соединений 3 и 2-цианопирисина [6], которое показывает, что разница в химсдвигах H-3 и H-5 протонов пирдинового кольца более ощутима для соединений 3 (~ 0,8 м.д.), тогда как эта разница для 2-цианопирисина составляет 0,288 м.д., где важную роль в данном процессе, по-видимому, играет акцепторность цианогруппы. К тому же для пирисина, содержащего в положении 2 метоксикарбонильную группу, акцепторность которой ниже, чем цианогруппы, но есть возможность образования BMBC между H-3 пирдинового фрагмента и атомом кислорода метоксикарбонильной группы, протон H-3 смешен в более слабое поле, и разница в химсдвигах между сигналами H-3 и H-5

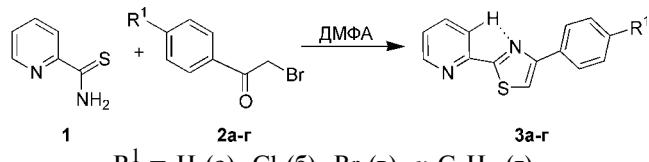
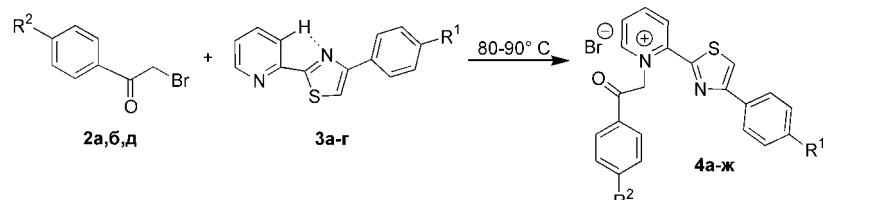


Схема 1



$\text{R}^1 = \text{R}^2 = \text{H}$  (**4a**);  $\text{R}^1 = \text{H}, \text{R}^2 = \text{Cl}$  (**4b**);  $\text{R}^1 = \text{Cl}, \text{R}^2 = \text{H}$  (**4c**);  $\text{R}^1 = \text{R}^2 = \text{Cl}$  (**4d**);  $\text{R}^1 = \text{Cl}, \text{R}^2 = \text{CH}_3\text{O}$  (**4e**);  $\text{R}^1 = \text{Br}, \text{R}^2 = \text{H}$  (**4f**);  $\text{R}^1 = h\text{-C}_4\text{H}_9, \text{R}^2 = \text{H}$  (**4g**)

Схема 2

составляет 0,406 м.д [6], что больше, чем для 2-цианопиридина.

Эти данные и результаты, полученные нами ранее [1, 5], хотя косвенно, но все же указывают на возможность образования ВМВС между атомом азота тиазольного кольца и атомом водорода H-3 пиридинового цикла.

Для решения второй задачи нами были получены пиридиниевые соли **4** при нагревании без растворителя соединений **3** с  $\omega$ -бромацетофенами **2** [7].

Строение соединений **4** подтверждено комплексными спектральными и рентгеноструктурным исследованием (экспериментальная часть). В спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  солей **4** протоны H-3, как и все остальные протоны пиридинового цикла, смешиваются в слабое поле и проявляются в виде дублетов с КССВ 7,74–8,21 Гц либо двойного дублета у соединения **4g** в области 8,79–8,83 м.д. Наиболее сильное смещение в слабое поле отмечается у H-4 пиридинового цикла — 8,89–8,91 м.д., в результате чего этот протон занимает свое обычное положение в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$ , характерное для пиридина [8].

Рентгеноструктурный анализ (PCA) бромида пиридиния **4a** однозначно указывает на исчезновение ВМВС между H-3 пиридинового кольца и атомом азота тиазольного фрагмента (рис. 1, 2). Установлено также, что в кристалле соединения **4a** имеются две симметрически независимые моле-

кулы А и Б с довольно близкой геометрией. Общий вид молекулы А и ее основные геометрические параметры приведены на рис. 1. Гетероциклические фрагменты N(2)C(10-14) и N(1)S(1)C(1-3) плоские (максимальные среднеквадратичные отклонения составляют 0.035 и 0.011 Å соответственно). Двухгранный угол между этими циклами составляет 31.8°, а фенильное кольцо C(4-9) развернуто относительно тиазольного N(1)S(1)C(1-3) на 22.8°. Бензольное кольцо C(18-22) в результате стерических эффектов значительно развернуто относительно среднеквадратической плоскости гетероциклов N(2)C(10-14) и N(1)S(1)C(1-3) (соответствующий угол разворота составляет 74.94°). Кристаллическая упаковка молекул соединения **4a** изображена на рис. 2.

#### Экспериментальная часть

Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  синтезированных соединений получены на приборе “Bruker AVANCE II-400”, 400 МГц (ДМСО-d<sub>6</sub>), внутренний стандарт — ТМС. ИК-спектры записаны на приборе ИКС-40 в вазелиновом масле. Масс-спектры зарегистрированы на приборе Varian 1200L (70 эВ). Температуры плавления измерены на блоке Коффера. Контроль за ходом реакции и чистотой полученных соединений осуществляли методом ТСХ (пластины Silufol UV-254, ацетон-гексан 3:5, проявитель — пары йода).

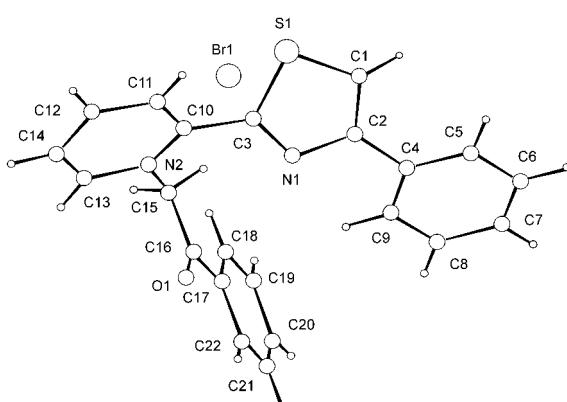


Рис. 1. Общий вид молекулы (**4a**). Основные длины связей (Å) и валентные углы (град.): S(1)-C(1) 1.690(6), S(1)-C(3) 1.724(5), O(1)-C(16) 1.209(6), N(1)-C(2) 1.376(6), N(1)-C(3) 1.319(7), N(2)-C(10) 1.351(6), N(2)-C(14) 1.355(6), N(2)-C(15) 1.486(6), C(1)-C(2) 1.368(8); C(1)S(1)C(3) 89.1(3), C(2)N(1)C(3) 110.4(4), C(10)N(2)C(14) 121.6(4), C(10)N(2)C(15) 123.1(4), C(14)N(2)C(15) 115.3(4), S(1)C(1)C(2) 111.6(4).

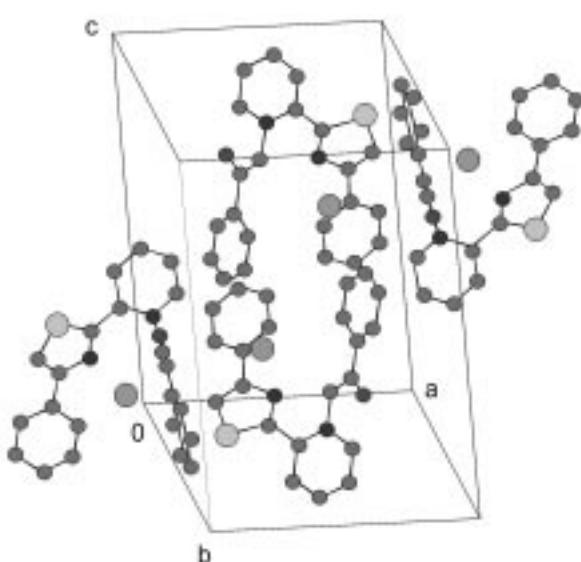


Рис. 2. Кристаллическая упаковка соединения **4a**.

Рентгеноструктурное исследование монокристалла соединения **4a** с линейными размерами  $0.31 \times 0.37 \times 0.43$  мм проведено при комнатной температуре на автоматическом четырехкружном дифрактометре Enraf-Nonius CAD-4 (MoK $\alpha$ -излучение,  $\lambda = 0.71069$  Å, отношение скоростей сканирования  $2\theta/\omega$  1,2,  $\theta_{\max} = 25^\circ$ , сегмент сферы  $0 \leq h \leq 12$ ,  $-16 \leq k \leq 16$ ,  $-17 \leq l \leq 17$ ). Всего собрано 7439 отражений, из которых 7030 являются симметрически независимыми ( $R_{\text{int}} = 0.014$ ). Кристаллы соединения (I) триклинические,  $a = 10.915(6)$ ,  $b = 13.919(9)$ ,  $c = 14.451(5)$  Å,  $\alpha = 113.77(5)$ ,  $\beta = 91.46(4)$ ,  $\gamma = 95.08(6)^\circ$ ,  $V = 1997(2)$  Å $^3$ ,  $M = 437.36$ ,  $Z = 4$  (две независимые молекулы),  $d_{\text{выч}} = 1,45$  г/см $^3$ ,  $\mu = 2.177$  см $^{-1}$ ,  $F(000) = 888.000$ , пространственная группа Р 1 (N 2). Структура расшифрована прямым методом и уточнена методом наименьших квадратов в полноматричном анизотропном приближении с использованием комплекса программ CRYSTALS [9]. В уточнении использовано 3695 отражений с  $I > 3\sigma$  (I) (487 уточняемых параметров, число отражений на параметр — 7,6). Положения всех атомов водорода были объективно выявлены из разностной карты электронной плотности и включены в уточнение с фиксированными тепловыми и позиционными параметрами. При уточнении была использована весовая схема Чебышева [10] с параметрами: 1,35, -0,09, 1,18, -0,12 и 0,18. Окончательные значения факторов расходимости  $R = 0.042$  и  $R_w = 0.043$ , GOF = 1,072. Остаточная электронная плотность из разностного ряда Фурье составляет -0,26 и 0,64 е/Å $^3$ . Учет поглощения в кристалле был выполнен с помощью метода азимутального сканирования [11].

**2-(4-Арил-1,3-тиазол-2-ил)пиридини (За-г).** 2-Тиокарбомоилпиридин **1** (5 ммоль) и 5 ммоль ароилметилбромида **2a-g** в 7-8 мл диметилформамида выдерживали 2-3 ч при комнатной температуре и 12-14 ч при температуре 3-5°C, добавляли равный объем дистиллированной воды и выдерживали в холодильнике еще 4-6 ч. Осадок отфильтровывали, промывали 2 раза по 5 мл 50%-ным водным раствором СН<sub>3</sub>ОН, сушили гексаном и соединения **За-г** кристаллизовали из метанола.

**2-(4-Фенил-1,3-тиазол-2-ил)пиридин (За).** Выход — 92%. Т.пл. — 62°C. Найдено, %: С 70,48; Н 4,19; N 11,54. C<sub>14</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>S. Вычислено, %: С 70,56; Н 4,23; N 11,76. М. 238,31. Масс-спектр, m/z (I отн, %) катиона M $^+$ : 238 (100). Спектр ЯМР  $^1$ H, δ, м.д.: 7,32 т (1H, аром, J = 7,35 Гц, 7,35 Гц), 7,40-7,44 м (3H, аром, H-5), 7,91 дт (1H, H-4, J = 7,89 Гц, 7,70 Гц, 1,67 Гц), 7,95 д (1H, тиазол, J = 1,11 Гц), 8,02 д (2H, аром, J = 8,00 Гц), 8,27 д (1H, H-3, J = 7,89 Гц), 8,59 д (1H, H-6, J = 4,77 Гц).

**2-(4-*n*-Хлорфенил-1,3-тиазол-2-ил)пиридин (3б).** Выход — 96%. Т.пл. — 160-162°C. Найдено, %: С 61,60; Н 2,94; N 9,93. C<sub>14</sub>H<sub>9</sub>BrN<sub>2</sub>S. Вычислено, %: С 61,65; Н 3,33; N 10,27. М. 272,75. Спектр ЯМР  $^1$ H, δ, м.д.: 7,42-7,45 м (3H, аром, H-5), 7,92 т (1H, H-4, J = 7,71 Гц, 7,71 Гц), 8,04 д (2H, аром, J =

8,46 Гц), 8,07 с (1H, тиазол), 8,25 д (1H, H-3, J = 7,86 Гц), 8,60 д (1H, H-6, J = 4,75 Гц).

**2-(4-*n*-Бромфенил-1,3-тиазол-2-ил)пиридин (3в).** Выход — 95%. Т.пл. — 145-146°C. Найдено, %: С 53,14; Н 2,74; N 9,01. C<sub>14</sub>H<sub>9</sub>BrN<sub>2</sub>S. Вычислено, %: С 53,01; Н 2,86; N 8,83. М. 317,20. Спектр ЯМР  $^1$ H, δ, м.д.: 7,44 дд (1H, H-5, J = 7,06 Гц, 5,29 Гц), 7,58 д (2H, аром, J = 8,50 Гц), 7,91-7,95 м (1H, H-4), 7,98 д (2H, аром, J = 8,50 Гц), 8,12 с (1H, тиазол), 8,25 д (1H, H-3, J = 7,89 Гц), 8,60 д (1H, H-6, J = 4,77 Гц).

**2-(4-*n*-Бутилфенил-1,3-тиазол-2-ил)пиридин (3г).** Выход — 98%. Т.пл. — 97-99°C. Найдено, %: С 73,37; Н 6,23; N 9,77. C<sub>18</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>S. Вычислено, %: С 73,43; Н 6,16; 9,51. М. 294,41. Спектр ЯМР  $^1$ H, δ, м.д.: 0,95 т (3H, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, J = 7,34 Гц, 7,34 Гц), 1,33-1,42 м (2H, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), 1,59-1,66 м (2H, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>), 2,63 т (2H, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, J = 7,67 Гц, 7,67 Гц), 7,21 д (2H, аром, J = 8,05 Гц), 7,41 дд (1H, H-5, J = 7,42 Гц, 4,87 Гц), 7,87-7,91 м (4H, аром, тиазол, H-4), 8,26 д (1H, H-3, J = 7,89 Гц), 8,59 д (1H, H-6, J = 4,71 Гц).

**N-Ароилметил-2-(4-арил-1,3-тиазол-2-ил)пиридиния бромиды (4а-ж).** Ароилметилбромид (2а,б,д) (5 ммоль) и 5 ммоль одного из соединений (3а-г) сплавляли на протяжении 3-5 ч при температуре 80-90°C, после чего реакционную смесь охлаждали и заливали 25-30 мл ацетона. Через 2-3 дня образовавшиеся кристаллы отфильтровывали, промывали 2-3 порциями ацетона по 10 мл и соединения (4а-ж) кристаллизовали из этанола.

**1-(2-Оксо-2-фенилэтил)-2-(4-фенил-1,3-тиазол-2-ил)пиридиния бромид (4а).** Выход — 92%. Т.пл. — 203-204°C (205°C из метанола [6]). Найдено, %: С 60,35; Н 3,63; N 6,39. C<sub>22</sub>H<sub>17</sub>BrN<sub>2</sub>OS. Вычислено, %: С 60,42; Н 3,92; N 6,41. М. 437,35. ИК-спектр, ν, см $^{-1}$ : 1700 (C=O). Спектр ЯМР  $^1$ H, δ, м.д.: 6,96 с (2H, CH<sub>2</sub>), 7,02 т (2H, аром, J = 7,67 Гц, 6,67 Гц), 7,17 т (1H, аром, J = 7,38 Гц, 7,38 Гц), 7,38 д (2H, аром, J = 7,44 Гц), 7,62 т (2H, аром, J = 7,71 Гц, 7,71 Гц), 7,77 т (1H, аром, J = 7,41 Гц, 7,41 Гц), 8,13 д (2H, аром, J = 7,65 Гц), 8,38 т (1H, H-5, J = 6,75 Гц, 6,75 Гц), 8,58 с (1H, тиазол), 8,82 д (1H, H-3, J = 7,74 Гц), 8,90 т (1H, H-4, J = 7,90 Гц, 7,90 Гц), 9,36 д (1H, H-6, J = 5,26 Гц).

**1-[2-Оксо-2-(*n*-хлорфенил)этил]-2-(4-фенил-1,3-тиазол-2-ил)пиридиния бромид (4б).** Выход — 68%. Т.пл. — 207-210°C. Найдено, %: С 56, 14; Н 3,55; N 6,01. C<sub>22</sub>H<sub>16</sub>BrClN<sub>2</sub>OS. Вычислено, %: С 56,01; Н 3,42; N 5,94. М. 471,80. ИК-спектр, ν, см $^{-1}$ : 1706 (C=O). Спектр ЯМР  $^1$ H, δ, м.д.: 6,96 с (1H, CH<sub>2</sub>), 7,06 т (2H, аром, J = 7,66 Гц, 7,66 Гц), 7,21 т (1H, аром, J = 7,36 Гц, 7,36 Гц), 7,38 д (2H, аром, J = 7,42 Гц), 7,59 д (2H, аром, J = 8,49 Гц), 8,13 д (2H, аром, J = 8,49 Гц), 8,39 т (1H, H-5, J = 6,89 Гц, 6,89 Гц), 8,59 с (1H, тиазол), 8,82 д (1H, H-3, J = 8,10 Гц), 8,91 т (1H, H-4, J = 7,91 Гц, 7,91 Гц), 9,40 д (1H, H-6, J = 5,76 Гц).

**1-(2-Оксо-2-фенилэтил)-2-[4-(*n*-хлорфенил)-1,3-тиазол-2-ил]пиридиния бромид (4в).** Выход — 55%. Т.пл. — 213-216°C. Найдено, %: С 56, 28; Н

3,48; N 5,50. C<sub>22</sub>H<sub>16</sub>BrClN<sub>2</sub>OS. Вычислено, %: C 56,01; H 3,42; N 5,94. M. 471,80. Масс-спектр, m/z (I отн.%) орг. катиона M<sup>+</sup>: 391,5 (4,3). ИК-спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 1708 (C=O). Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м.д.: 6,94 с (2H, CH<sub>2</sub>), 7,01 д (2H, аром, J = 8,52 Гц), 7,40 д (2H, аром, J = 8,52 Гц), 7,64 т (2H, аром, J = 7,74 Гц, 7,74 Гц), 7,79 т (1H, аром, J = 7,43 Гц, 7,43 Гц), 8,13 д (2H, аром, J = 7,43 Гц), 8,39 т (1H, H-5, J = 6,90 Гц, 6,90 Гц), 8,67 с (1H, тиазол), 8,82 д (1H, H-3, J = 8,11 Гц), 8,91 т (1H, H-4, J = 7,91 Гц, 7,91 Гц), 9,36 д (1H, H-6, J = 6,05 Гц).

**1-[2-Оксо-2-(n-хлорфенил)этил]-2-[4-(n-хлорфенил)-1,3-тиазол-2-ил]пиридиния бромид (4г).** Выход — 75%. Т.пл. — 210–213°C. Найдено, %: C 56,28; H 3,48; N 5,50. C<sub>22</sub>H<sub>15</sub>BrCl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>OS. Найдено, %: C 52,20; H 2,99; N 5,53. M. 506,24. Масс-спектр, m/z (I отн.%) орг. катиона M<sup>+</sup>: 426 (11,2). ИК-спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 1702 (C=O). Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м.д.: 6,84 с (2H, CH<sub>2</sub>), 7,08 д (2H, аром, J = 8,56 Гц), 7,40 д (2H, аром, J = 8,56 Гц), 7,62 д (2H, аром, J = 8,61 Гц), 8,11 д (2H, аром, J = 8,61 Гц), 8,38 дд (1H, H-5, J = 7,68 Гц, 6,29 Гц, 1,46 Гц), 8,80 дд (1H, H-3, J = 8,17 Гц, 1,35 Гц), 8,89 дт (1H, H-4, J = 7,97 Гц, 7,97 Гц, 1,35 Гц), 9,26 дд (1H, H-6, J = 5,15 Гц, 1,46 Гц).

**1-[2-(n-Метоксифенил)-2-оксоэтил]-2-[4-(n-хлорфенил)-1,3-тиазол-2-ил]пиридиния бромид (4д).** Выход — 72%. Т.пл. — 203–205°C. Найдено, %: C 52,12; H 2,93; N 5,52. C<sub>23</sub>H<sub>18</sub>BrClN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>S. Вычислено, %: C 55,05; H 3,62; N 5,58. M. 501,82. ИК-спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 1709 (C=O). Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м.д.: 3,93 с (3H, OCH<sub>3</sub>), 6,82 с (2H, CH<sub>2</sub>), 7,06 д (2H, аром, J = 8,53 Гц), 7,09 д (2H, аром, J = 8,85 Гц), 7,43 д (2H, аром, J = 8,53 Гц), 8,06 д (2H, аром, J = 8,85 Гц), 8,37 т (1H, H-5, J = 6,95 Гц, 6,95 Гц), 8,64 с (1H, тиазол), 8,79 д (1H, H-3, J = 8,04 Гц), 8,88 т (1H, H-4, J = 7,93 Гц, 7,93 Гц), 9,31 д (1H, H-6, J = 5,07 Гц).

## Література

1. Khoroshilov G., Demchak I., Saraeva T. // *Synthesis*. — 2008. — №10. — P. 1541-1544.
2. Pauls H., Krohnke F. // *Chem. Ber.* — 1977. — Bd. 110. — S. 1294-1303.
3. Knott R.F., Breckenridge J.G. // *Canad. J. Chem.* — 1954. — Vol. 32. — P. 512-513.
4. Хорошилов Г.Є., Яроцький Ю.В. // Наук. записки Терноп. нац. пед. ун-ту ім. Володимира Гнатюка. Сер. Хімія. — 2007. — №12. — С. 26-28.
5. Хорошилов Г.Е., Демчак І.В. // Вісник Харк. нац. ун-ту. — 2007. — Вип. 15 (38), №770. Хімія. — С. 210-217.
6. Денисов А.Ю., Маматюк В.И., Шкурко О.П. // ХГС. — 1984. — №9. — С. 1223-1230.
7. Glover E.E., Thomas T.R. // *J. Chem. Soc. (C)*. — 1967. — P. 463-466.
8. Batterthem T.J. *NMR Spectra of Simple Heterocycles*. — New York: Wiley, 1973. — P. 8.
9. Watkin D.J., Prout C.K., Carruthers J.R., Betteridge P.W. // *CRYSTALS, Issue 10, Chemical Crystallography Laboratory, Univ. of Oxford*, 1996.
10. Carruthers J.R., Watkin D.J. // *Acta Cryst. (A)*. — 1979. — Vol. 35, №3. — P. 698-699.
11. North A.C.T., Phillips D.C., Mathews F.S. // *Acta Cryst. (A)*. — 1968. — Vol. 24, №2. — P. 351-359.

Надійшла до редакції 13.03.2009 р.

**1-(2-Оксо-2-фенилэтил)-2-[4-(n-бромфенил)-1,3-тиазол-2-ил]пиридиния бромид (4е).** Выход — 90%. Т.пл. — 215–217°C. Найдено, %: C 51,04; H 3,01; N 5,56. C<sub>22</sub>H<sub>16</sub>Br<sub>2</sub>N<sub>2</sub>OS. Вычислено, %: C 51,18; H 3,12; N 5,43. M. 516,25. ИК-спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 1706 (C=O). Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м.д.: 6,96 с (2H, CH<sub>2</sub>), 7,01 д (2H, аром, J = 8,52 Гц), 7,40 д (2H, аром, J = 8,52 Гц), 7,64 т (2H, аром, J = 7,74 Гц, 7,74 Гц), 7,79 т (1H, аром, J = 7,43 Гц, 7,43 Гц), 8,13 д (2H, аром, J = 7,43 Гц), 8,39 т (1H, H-5, J = 6,90 Гц, 6,90 Гц), 8,67 с (1H, тиазол), 8,82 д (1H, H-3, J = 8,11 Гц), 8,91 т (1H, H-4, J = 7,91 Гц, 7,91 Гц), 9,36 д (1H, H-6, J = 6,05 Гц).

**1-(2-Оксо-2-фенилэтил)-2-[4-(n-бутилфенил)-1,3-тиазол-2-ил]пиридиния бромид (4ж).** Выход — 74%, Т.пл. — 205–207°C. Найдено, %: C 63,40; H 4,95; N 5,48. C<sub>26</sub>H<sub>25</sub>BrN<sub>2</sub>OS. Вычислено, %: C 63,28; H 5,11; N 5,68. M. 493,46. ИК-спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 1711 (C=O). Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м.д.: 0,93 т (3H, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, J = 7,32 Гц, 7,32 Гц), 1,25-1,35 м (2H, CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), 1,47-1,55 м (2H, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>), 2,48-2,52 м (2H, CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, сигнал маскирован сигналом ДМСО), 6,81 д (2H, аром, J = 8,09 Гц), 6,93 с (2H, CH<sub>2</sub>), 7,28 д (2H, аром, J = 8,09 Гц), 7,61 т (2H, аром, J = 7,73 Гц, 7,73 Гц), 7,76 т (1H, аром, J = 7,40 Гц, 7,40 Гц), 8,12 д (2H, аром, J = 7,40 Гц), 8,37 т (1H, H-5, J = 6,93 Гц, 6,93 Гц), 8,49 с (1H, тиазол), 8,80 д (1H, H-3, J = 8,21 Гц), 8,89 т (1H, H-4, J = 7,95 Гц, 7,95 Гц), 9,31 д (1H, H-6, J = 5,94 Гц).

## Выводы

1. При сплавлении 2-(4-арил-1,3-тиазол-2-ил)пиридинов с ароилметилбромидами получены новые производные N-замещенных 2-(4-арилтиазол-2-ил)пиридиния бромидов.

2. Строение этих соединений доказано комплексными спектральными исследованиями и РСА.