

УДК 547.814.5

СИНТЕЗ НОВОЇ ГЕТЕРОЦИКЛІЧНОЇ СИСТЕМИ [1]БЕНЗОФУРО[2,3-*e*][1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-*a*]ПІРИМІДИНУ

Т.М.Ткачук

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64. E-mail: tkachuk_t@univ.kiev.ua**Ключові слова:** 3-феноксихромон, [1]бензофуоро[2,3-*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*a*]піримідин

Взаємодія хромонів з бінуклеофільними агентами, зокрема амідинами приводить до розкриття піронового кільця та наступного формування піримідинового циклу [1-3]. Виявлено, що при взаємодії 3-феноксихромону 1 з амінотриазолом 2, що містить амідиний фрагмент, реакція не зупиняється на стадії утворення адукту триазолопіримідинової системи 3: гідроксил фенольного ядра нуклеофільно заміщує феноксильну групу з утворенням сполуки 4 — похідної нової гетероциклічної системи [1]бензофуоро[2,3-*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*a*]піримідину (схема). Хроматомас-спектрометричний аналіз реакційної суміші свідчить про наявність чотирьох речовин: сполук 1, 4, *p*-хлорфенолу і кетону — продукту розмикання хромону 1 під дією основних агентів. Реакція феноксихромону 1 з гуанідином перебігає за очікуваною схемою з утворенням продукту 5.

Структуру сполук 4,5 доведено на основі мас-спектрів, спектрів ЯМР ^1H , ^{13}C , ^{19}F , РСА-аналізом.

8-Метокси-2,5-біс(трифторометил)[1]бензофуоро[2,3-*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*a*]піримідин (4)

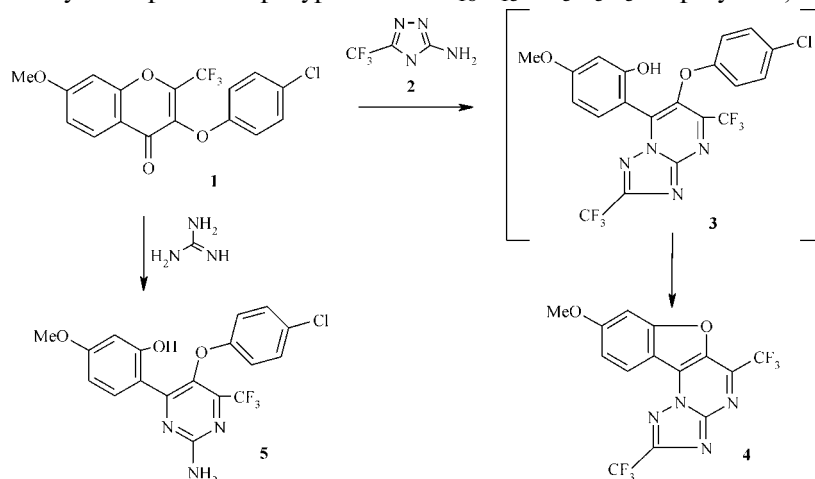
Суміш 0,74 г (2 ммоль) 3-(4-хлорофенокси)-7-метокси-2-(трифторометил)-4Н-хромен-4-ону.

(1), 0,45 г (3 ммоль) 3-(трифторометил)1Н-1,2,4-триазол-5-іламіну (2), 0,28 г (2 ммоль) поташу в 10 мл ДМФА перемішують при температурі 100-

110°C протягом 30 хв, додають 50 мл води, відфільтровують осад, що випав. Кристалізують з толуолу. Вихід — 76%. Т.пл. — 205-206°C. Спектр ЯМР ^1H (400 МГц, ДМСО- d_6), δ , м.д., J (Гц): 8,36 (1H, д, $^3J=8,8$, H-10); 7,72 (1H, д, $^4J=2,0$, H-7); 7,35 (1H, дд, $^3J=8,8$, $^4J=2,0$, H-9); 4,04 (3H, с, OCH $_3$ -8). Спектр ЯМР ^{13}C (100 МГц, ДМСО- d_6), δ , м.д., J (Гц): 165,67; 160,01; 157,29 (J=39,9); 152,46; 139,17; 136,51 (J=37,4); 135,30; 124,22; 120,41 (J=273,5, CF $_3$); 119,77 (J=269,0, CF $_3$); 117,25; 108,15; 97,97; 57,28 (CH $_3$ O). Спектр ЯМР ^{19}F (400 МГц, ДМСО- d_6), δ , м.д.: 98,37; 97,43. Мас-спектр: (m/z, eI): 376(M $^+$); 361 (M $^+$ - CH $_3$); 333 (M $^+$ - CH $_3$ - N $_2$); 69 (CF $_3$). Знайдено, %: N — 14,72 C $_{14}$ H $_6$ F $_6$ N $_4$ O $_2$. Вираховано, %: N — 14,89.

2-[2Аміно-5-(4-хлорофенокси)-6(трифторометил)-4-піримідиніл]-5-метоксифенол (5)

Сполуку 5 одержують аналогічно 4, використовуючи в якості нуклеофільного реагенту карбонат гуанідину (0,36 г, 2 ммоль). Реакція перебігає за 15 хв. Вихід — 85% (з ацетонітрилу). Т.пл. — 188°C. Спектр ЯМР ^1H (400 МГц, ДМСО- d_6), δ , м.д., J (Гц): 12,86 (1H, с, OH-1); 7,87(1H, д, $^3J=9,2$, H-3); 7,54 (2H, ус, NH $_2$); 7,18 (2H, д, $^3J=9,2$, H-2', H-6'); 6,80 (2H, д, $^3J=9,2$, H-3', H-5'); 6,33 (1H, д, $^4J=2,8$, H-6); 6,23 (1H, дд, $^3J=9,2$, $^4J=2,8$, H-4); 3,73 (3H, с, OCH $_3$ -5). Знайдено, %: Cl — 8,65; N — 10,27 C $_{18}$ H $_{13}$ ClF $_3$ N $_3$ O $_3$. Вираховано, %: Cl — 8,61; N — 10,20.



Схема

Література

1. Пивоваренко В.Г., Ткачук Т.М. // *Ukrainica Bioorganica Acta*. — 2005. — №2. — С. 22-26.
2. Хуля В.П., Туров А.В., Ткачук Т.М., Шевчук Л.И. // *Химия природ. соединений*. — 2001. — С. 422-426.
3. Sosnovskikh V., Usachev B., Sizov A., Varabanov M. // *Synthesis*. — 2004. — №6. — P. 942-948.

Надійшла до редакції 25.06.2007 р.