

ОРГАНИЧЕСКАЯ И БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 547.854

НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ БЕНЗО[4,5]ИМИДАЗО[2',1':6,1]ПИРИДО[2,3-d]ПИРИМИДИНА

А. А. АРУТЮНЯН^а, Г. А. ПАНОСЯН^б, Р. А. ТАМАЗЯН^б и А. Г. АЙВАЗЯН^б

^аНаучно-технологический центр органической и фармацевтической химии
НАН Республики Армения

Институт тонкой органической химии им. А. Л. Мнджояна
Армения, 0014, Ереван, пр. Азатутян, 26
e-mail: harutyunyan.arthur@yahoo.com

^бЦентр исследования строения молекулы НАН Республики Армения

Поступило 18 IV 2016

Взаимодействием 2-метил-3-(6-метил-4-оксо-2-тиоксо-1,2,3,4-тетрагидро-5-пиримидинил)пропановой кислоты с 1,2-бензолдиамином в полифосфорной кислоте (ПФК) в условиях сокатализа эквимолекулярным количеством $ZnCl_2$ синтезирован 4,6-диметил- 5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-гидросульфид, который превращен в соответствующий дисульфид и замещенные 2-бензилсульфанилпроизводные. Синтезированные нами ранее замещенные 5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-ол и 2-тиол превращены соответственно в 2-хлор-, -амино-, метиламино- и анилинопроизводные и 2-(2'-хлорбензил)сульфанилпроизводное. Строение всех синтезированных соединений доказано методом ЯМР-спектроскопии, а 2-хлорпроизводного – также и рентгеноструктурным анализом (РСА).

Рис. 2, табл. 1, библиографические ссылки 4.

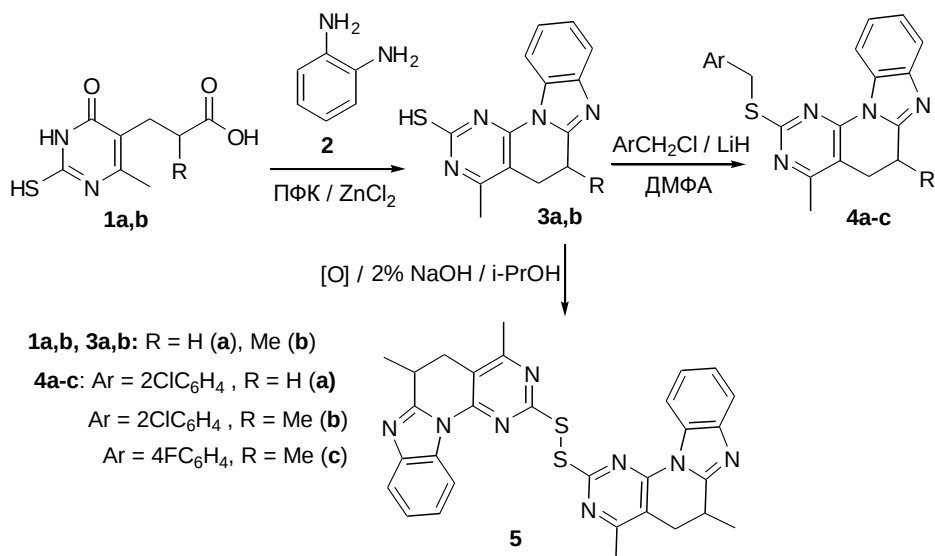
Ранее взаимодействием 3-(6-метил-4-оксо-2-тиоксо-1,2,3,4-тетрагидро-5-пиримидинил)пропановой кислоты (**1a**) с 1,2-бензолдиамином (**2**) в полифосфорной кислоте (ПФК) в условиях сокатализа эквимолекулярным количеством $ZnCl_2$ нами был получен 5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-гидросульфид (**3a**) [1]. Отметим, что упомянутая реакция, протекающая в среде ПФК, реализуется только в присутствии $ZnCl_2$, поскольку в его отсутствие реакция останавли-

вается на стадии образования замещенного бензимидазо-2-ил-6-пиримидинона [2].

Расширяя границы разработанного метода, конденсацией 2-метил-3-(6-метил-4-оксо-2-тиоксо-1,2,3,4-тетрагидро-5-пиримидинил)пропановой кислоты (**1b**) с диамином **2** в смеси ПФК / ZnCl_2 синтезирован 4,6-диметил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-гидросульфид (**3b**). Соединения **3a** и **3b** алкилированием бензилгалогенидами превращены в 2-(2-хлор- и 4-фтор-)бензилсульфанилпроизводные **4a-c**, а гидросульфид **3b** подвергнут окислению в аэробных условиях в щелочной среде в соответствующий дисульфид **5** по схеме 1.

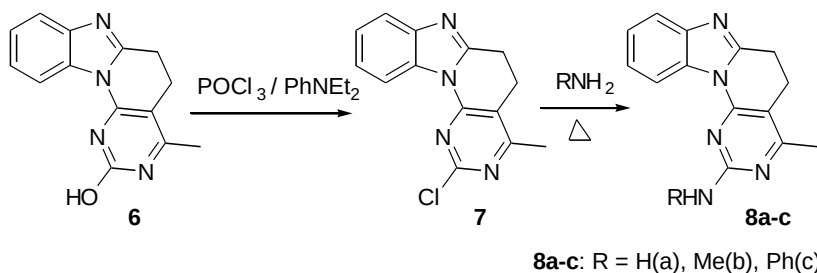
Соединения с асимметрическим атомом углерода получены в виде рацемических смесей изомеров.

Схема 1



Осуществлены некоторые превращения синтезированного ранее 5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-ола **6** [1] хлорированием в системе POCl_3 — N,N -диэтиланилин и аминлизом полученного 2-хлорпроизводного **7** с образованием 2-аминопроизводных **8a-c** по схеме 2.

Схема 2



Нами исследованы молекулярная и кристаллическая структуры 2-хлорпроизводного **7** методом РСА. Структура молекулы соединения представлена на рис. 1 (нумерация атомов произвольная).

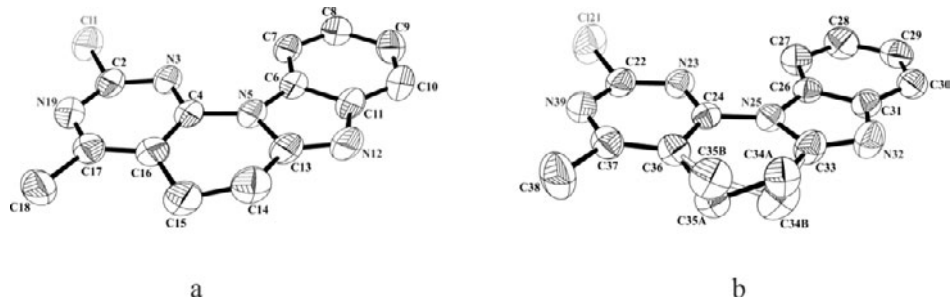


Рис. 1. Структуры симметрично неэквивалентных молекул соединения **A** с нашей нумерацией. Эллипсоиды представлены на уровне 50% вероятности. Для наглядности ориентации молекул выбраны независимо от взаимной ориентации в кристаллической структуре: (а) молекула с упорядоченной структурой, (б) молекула с неупорядоченной структурой.

Рентгенструктурный анализ кристалла соединения **7** показал, что в элементарной ячейке имеются две симметрично неэквивалентные молекулы. При этом в одной из молекул наблюдается неупорядоченность структуры, связанная со статистическим проявлением двух возможных конформаций пиперидинового кольца (рис 1b), в то время как в другой молекуле проявляется только одна из конформаций (рис. 1a).

Молекула исследуемого соединения тетрациклическая. Рассматривая циклические фрагменты по отдельности, было выявлено, что фенильное, имидазольное и пиримидиновое кольца имеют почти плоскую конформацию. Отклонения атомов от усредненных плоскостей не превышают 0.0055(5), 0.0095(5), 0.0117(5) Å, соответственно.

Пиперидиновое кольцо имеет конформацию полукресла, отклонения атомов C14 и C15 от плоскости полукресла составляют 0,2817(5) и -0,1633(5) Å, а атомы C34(A,B) и C35(B,A) от соответствующей плоскости отклонены на $\pm 0.2526(5)$ и $\pm 0.4100(5)$ Å.

Анализ трехмерной упаковки молекул в кристаллической решетке показал, что молекулы, связываясь неклассическими водородными связями (C14-H14B.....N39 и C15-H15B.....N3i), образуют тетрамер (рис. 2). При этом, внутренние молекулы тетрамера имеют упорядоченную структуру, а конечные — неупорядоченную структуру. По всей вероятности, конформации внутренних молекул фиксируются водородными связями, в силу чего для них не наблюдается неупорядоченность (рис. 2).

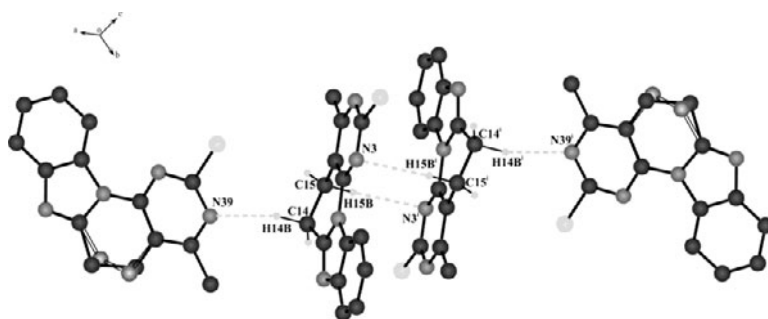


Рис. 2. Тетрамер молекул, образованный с помощью неклассических водородных.

Геометрия неклассических водородных связей приведена в таблице.

Таблица

Геометрия неклассических водородных связей

D-H·····A	D-H (Е)	H·····A (Е)	D-A (Е)	D-H·····A (град.)	код сим-метрии
C14-H14B·····N39	1.11(3)	2.59(3)	3.491(3)	138(2)	
C15-H15B·····N3 ⁱ	1.15(3)	2.57(3)	3.603(3)	149(2)	(i) 1-x; 1-y; 2-z

Чистота синтезированных соединений определена с помощью ТСХ, строение — данными элементного анализа и ЯМР ^1H -спектроскопией.

Экспериментальная часть

ИК-спектры сняты на приборе "Nicolet Avatar 330" в вазелиновом масле, спектры ЯМР ^1H — на приборе "Varian Mercury-300" с рабочей частотой 300 МГц в растворе $\text{DMSO-d}_6/\text{CCl}_4$: 1/3, внутренний стандарт — ТМС. ТСХ проведена на пластинках марки "Silufol UV-254" в системе этанол—дихлорэтан (1:10) для соединений 3-5,7,8, проявитель — пары йода.

Дифракционные измерения проведены при комнатной температуре на автодифрактометре "Enraf-Nonius CAD-4" (графитовый монохроматор, Мо-К излучение, $\theta/2\theta$ -сканирование). Параметры триклинной элементарной ячейки определены и уточнены по 24 рефлексам с $14.0 < \theta < 15.8$, $a = 7.7912(16)\text{Å}$, $b = 22.537(5)\text{Å}$, $c = 13.856(3)\text{Å}$, $\alpha = 90.40(3)^\circ$, $\beta = 98.58(3)^\circ$, $\gamma = 103.44(3)^\circ$, $V = 1234.4(5)\text{Å}^3$. В ходе дифракционного эксперимента были измерены интенсивности 7668 отражений в области 0° h 10° ; -16° k 16° ; -19° l 19° , $\theta_{\text{макс}} = 30^\circ$. Статистический анализ распределения интенсивностей в массиве дифракционных данных определил пр.гр. $P-1(z=4)$. Массив данных содержал 7174 симметрично неэквивалентных

рефлексов, из них 5103 наблюдаемых ($I > 2(I)$). Учет поглощения проведен по методу пси-сканов. Структура расшифрована прямым методом. Координаты атомов водорода частично определены из разностных синтезов Фурье и уточнены свободно. Атомы водорода метильной группы были определены по геометрическим расчетам и уточнены по модели наездника со следующими условиями: длина связей $C-H = 0.96 \text{ \AA}$, $U_{iso}(H) = 1.5U_{eq}(C)$. Структура уточнена полноматричным МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов и изотропном — для атомов водорода, окончательный фактор расходимости $R = 0.0483$, $S = 1.01$. Все структурные расчеты были проведены по комплексу программ SHELXTL.

Кристаллографические данные в формате CIF депонированы в Кембриджском центре кристаллографических данных, номер депозита CCDC 1463824.

(RS)-4,6-Диметил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-ил гидросульфид (3b). Смесь 4.28 г (0.02 моля) кислоты **1b**, 2.38 г (0.022 моля) 1,2-диаминобензола, 2.74 г (0.02 моля) свежеплавленно-го $ZnCl_2$ в 25 г ПФК нагревают на бане Вуда в течение 5 ч при 220-230°C. После охлаждения до комнатной температуры остаток нейтрализуют разбавленным 1/1 NH_4OH , отфильтровывают, высушивают и полученный в количестве 4.5 г порошок коричневого цвета обрабатывают следующим образом. Продукт растворяют при нагревании до 70-80°C в 100 мл 1% раствора $NaOH$, после охлаждения до комнатной температуры отфильтровывают не растворимую в щелочном растворе коричневую примесь, маточный раствор подкисляют $AcOH$ до pH 6 и выпавший гидросульфид **5** в виде осадка желтого цвета отфильтровывают и высушивают. Выход 3.65 г (64.7%), т. пл. 288-290°C (ДМФА), R_f 0.33. Найдено, %: C 63.65; H 4.75; N 19.60; S 11.55. $C_{15}H_{14}N_4S$. Вычислено, %: C 63.81; H 5.00; N 19.84; S 11.35. ИК-спектр, ν , cm^{-1} : 1670, 1618 ($C=C$, $C=N$). Спектр ЯМР 1H (ДМСO- d_6), δ , м. д., Гц: 1.55 (д, 3H, $J = 6.8$, CH_3); 2.41 (с, 3H, CH_3); 2.53 (дд, 1H, $J_1 = 15.5$, $J_2 = 11.3$, CH_2); 3.06 (дд, 1H, $J_1 = 15.5$, $J_2 = 6.2$, CH_2); 3.33 (дкд, 1H, $J_1 = 11.3$, $J_2 = 6.8$, $J_3 = 6.2$, $CHCH_3$); 7.24-7.37 (м, 2H); 7.57-7.61 (м, 1H) и 8.60-8.63 (м, 1H, Ar); 13.34 (уш.с., 1H, SH).

Общая методика получения S-алкилированных производных 4a-с. Суспензию 2.82 г (0.01 моля) гидросульфида **3a,b**, 0.01 моля замещенного хлорметилбензола и 0.1 г (0.0125 моля) LiH в 10 мл высушенного ДМФА перемешивают 24 ч на кипящей водяной бане и выливают на 50 мл воды. После стояния на холоду в течение ночи выпавший продукт отфильтровывают и высушивают.

4-Метил-2-(2-хлорбензилсульфанил)-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин (4a) получен из **3a** и 1-хлор-2-хлорметилбензола. Выход 3.2 г (81.6 %), т. пл. 170-172°C (ДМФА), R_f 0.68. Найдено, %: C 64.36; H 4.18; Cl 9.25; N 14.52; S 8.30. $C_{21}H_{17}ClN_4S$. Вычислено, %: C 64.20;

H4.36; Cl 9.02; N14.26; S 8.16. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1680, 1612. ($\text{C}=\text{C}$, $\text{C}=\text{N}$). Спектр ЯМР ^1H (DMCO-d_6), δ , м. д., $\Gamma\text{ц}$: 2.54 (с, 3H, CH_3); 3.06 (т, 2H, $J = 7.4$, CH_2); 3.26 (т, 2H, $J = 7.4$, CH_2); 4.58 (с, 2H, SCH_2); 7.17-7.26 (м, 4H), 7.39-7.45 (м, 1H), 7.54-7.64 (м, 2H) и 8.19-8.25 (м, 1H, 2 x C_6H_4).

(RS)-4,6-Диметил-2-(2-хлорбензилсульфанил)-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин (4b) получен из **3** и 1-хлор-2-хлорметилбензола. Выход 3.65 г (83.5%), т. пл. 171-173°C (ДМФА), R_f 0.63. Найдено, %: C 63.65; H 4.75; N19.60; S 11.55. $\text{C}_{15}\text{H}_{14}\text{N}_4\text{S}$. Вычислено, %: C 63.81; H5.00; N19.84; S11.35. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1672, 1617 ($\text{C}=\text{C}$, $\text{C}=\text{N}$). Спектр ЯМР ^1H (DMCO-d_6), δ , м. д., $\Gamma\text{ц}$: 1.57 (д, 3H, $J = 6.8$, CHCH_3); 2.54 (с, 3H, CH_3); 2.68 (дд, 1H, $J_1 = 15.8$, $J_2 = 11.3$, CH_2); 3.20 (дд, 1H, $J_1 = 15.8$, $J_2 = 6.2$, CH_2); 3.35 (дкд, 1H, $J_1 = 11.3$, $J_2 = 6.8$, $J_3 = 6.2$, CHCH_3); 4.58 (с, 2H, SCH_2); 7.20-7.26 (м, 5H); 7.58-7.64 (м, 2H) и 8.20-8.26 (м, 1H, 2x C_6H_4).

(RS)-4,6-Диметил-2-(4-фторсульфанил)-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин (4c) получен из **3** и 4-фтор-1-хлорметилбензола. Выход 2.8 г (71.6%), т. пл. 143-145°C (ДМФА), R_f 0.61. Найдено, %: C 67.21; H 5.27; N 14.52; S 8.10. $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{FN}_4\text{S}$. Вычислено, %: C 67.50; H 5.15; F 4.85; N14.31; S8.19. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1675, 1620 ($\text{C}=\text{C}$, $\text{C}=\text{N}$). Спектр ЯМР ^1H (DMCO-d_6), δ , м. д., $\Gamma\text{ц}$: 1.58 (д, 3H, $J = 6.7$, CHCH_3); 2.53 (с, 3H, CH_3); 2.68 (дд, 1H, $J_1 = 15.8$, $J_2 = 11.2$, CH); 3.19 (дд, 1H, $J_1 = 15.8$, $J_2 = 6.2$, CH_2); 3.35 (дкд, 1H, $J_1 = 11.2$, $J_2 = 6.7$, $J_3 = 6.2$, CHCH_3); 4.46 (с, 2H, SCH_2); 6.97-7.05 (м, 2H, $\text{H}^{2,6}$, $\text{C}_6\text{H}_4\text{F}$); 7.20-7.27 (м, 2H, H-9,10); 7.43-7.50 (м, 2H, $\text{H}^{3,5}$, $\text{C}_6\text{H}_4\text{F}$); 7.58-7.63 (м, 1H, C_6H_4); 8.26-8.32 (м, 1H, C_6H_4).

(RS),(RS)-4,6-Диметил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-ил-4-метил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-ил дисульфид (5). В двугорлой колбе, снабженной обратным холодильником и трубкой для подвода воздуха, помещают раствор 2.82 г (0.01 моля) гидросульфида **3b** в 100 мл 1% NaOH и 10 мл изопропилового спирта, нагревают до 60-70°C и через раствор пропускают воздух, периодически восполняя убыль растворителей до примерно исходного объема и соотношения. После некоторого индукционного периода в колбе начинает появляться осадок желтого цвета, после чего окисление продолжают еще 6-7 ч. После стояния на холоду в течение ночи продукт отфильтровывают и высушивают. Выход 2.4 г (85.4%), т. пл. 267-269 °C (ДМФА), R_f 0.41. Найдено, %: C 64.28; H 4.80; N 20.05; S 11.55. $\text{C}_{30}\text{H}_{26}\text{N}_8\text{S}_2$. Вычислено, %: C 64.03; H 4.66; N 19.91; S 11.39. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1621 ($\text{C}=\text{C}$, $\text{C}=\text{N}$). Спектр ЯМР ^1H (DMCO-d_6), δ , м. д., $\Gamma\text{ц}$: 1.48 и 1.49 (оба д, по 3H, $J = 6.7$, 2x CHCH_3); 2.57 и 2.58 (оба с, по 1H, 2 x CH_3); 2.56- 2.68 (м, 2H, CH_2); 3.18 (дд, 2H, $J_1 = 16.0$, $J_2 = 6.4$, CH_2); 3.21-3.33 (м, 2H, CHCH_3); 7.06-7.21 (м, 4H), 7.53 (уш.д, 2H, $J = 7.9$) и 8.34-8.41 (м, 2H, Ar).

4-Метил-2-хлор-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин (7). Суспензию 2.52 г (0.01 моля) 2-ОН-производного **6** в смеси 30 мл POCl_3 и 1 мл N,N-диэтиланилина кипятят с обратным холодильником 5 ч. От прозрачного темного раствора отгоняют избыток хлорокиси фосфора, маслообразный остаток выливают на 100 г льда, выпавший после стояния на льду продукт отфильтровывают, тщательно промывают водой и высушивают. Выход 2.2 г (82.7 %), т. пл. 189-191°C (диоксан), R_f 0.74. Найдено, %: С 62.33; Н 4.38; N 20.59. $\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{ClN}_4$. Вычислено, %: С 62.11; Н 4.10; Cl 13.10; N 20.70. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 1714, 1615 (C=C, C=N). Спектр ЯМР ^1H (DMSO-d_6), δ , м. д., Гц: 2.52 (с, 3H, CH_3); 3.06-3.12 (м, 2H, CH_2); 3.24-3.30 (м, 2H, CH_2); 7.31-7.42 (м, 2H, Ar); 7.68 (дд, 1H, $J_1 = 7.4$, $J_2 = 1.5$, Ar); 8.32 (дд, 1H, $J_1 = 7.3$, $J_2 = 1.5$, Ar).

Общий метод получения 2-аминопроизводных 8a,b. Смесь 1.35 г (0.005 моля) 2-хлорпроизводного **7**, 10 мл 25% водного раствора аммиака и 3 мл этанола или 33% водного раствора метиламина и 3 мл этанола нагревают 5 ч в автоклаве при 150°C. После вскрытия автоклава содержимое упаривают досуха, остаток обрабатывают 20 мл воды, выпавший осадок отфильтровывают и высушивают.

4-Метил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-амин (8a) получен взаимодействием хлорпроизводного **7** с водным раствором аммиака. Выход 0.9 г (71.7%), т. пл. 239-241°C (диоксан), R_f 0.61. Найдено, %: С 66.83; Н 5.37; N 27.58. $\text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}_5$. Вычислено, %: С 66.92; Н 5.21; N 27.87. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3471, 3293, 3150 (NH_2), 1637 (C=C, C=N). Спектр ЯМР ^1H (DMSO-d_6), δ , м. д.: 2.35 (с, 3H, CH_3); 2.90-2.96 (м, 2H, CH_2); 3.17-3.23 (м, 2H, CH_2); 6.23 (уш.с, 2H, NH_2); 7.18-7.27 (м, 2H, Ar); 7.52-7.58 (м, 1H, Ar); 8.52-8.58 (м, 1H, Ar).

N2,4-Диметил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-амин (8b) получен взаимодействием хлорпроизводного **7** с водным раствором метиламина. Выход 1.0 г (78.7%), т. пл. 221-223°C (диоксан), R_f 0.64. Найдено, %: С 67.72; Н 5.52; N 26.65. $\text{C}_{15}\text{H}_{15}\text{N}_5$. Вычислено, %: С 67.91; Н 5.70; N 26.40. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3502, 3327, 3262 (NH), 1655, 1619 (C=C, C=N). Спектр ЯМР ^1H (DMSO-d_6), δ , м. д., Гц: 2.36 (с, 3H, CH_3); 2.93 (т, 2H, $J = 7.4$, CH_2); 2.99 (д, 3H, $J = 4.7$, NCH_3); 3.20 (т, 2H, $J = 7.4$, CH_2); 6.74 (уш.к, 1H, $J = 4.7$, NH); 7.17-7.26 (м, 2H); 7.53-7.59 (м, 1H) и 8.47-8.53 (м, 1H, Ar).

4-Метил-N2-фенил-5,6-дигидробензо[4',5']имидазо[2',1':6,1]пиридо[2,3-d]пиримидин-2-амин (8c). Смесь 1.35 г (0.005 моля) 2-хлорпроизводного **7** и 10 мл анилина кипятят с обратным холодильником 2 ч, к содержимому добавляют воду и отгоняют с паром избыток анилина. Доводят объем воды до 50 мл, выпавший продукт отфильтровывают и высушивают. Выход 1.2 г (73.4%), т. пл. 216-218°C (диоксан), R_f 0.54. Найдено, %: С 73.55; Н 5.47; N 21.60. $\text{C}_{20}\text{H}_{17}\text{N}_5$. Вычислено, %: С 73.37; Н 5.23; N 21.39. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3220 (NH), 1624 (C=C, C=N). Спектр ЯМР ^1H (DMSO-d_6), δ , м. д., Гц: 2.48 (с, 3H, CH_3); 2.98-3.04 (м, 2H, CH_2); 3.22-3.28 (м, 2H,

CH₂); 6.94 (тт, 1H, J₁ = 7.3, J₂ = 1.1, H⁴-Ph); 7.21-7.30 (м, 4H), 7.55-7.61 (м, 1H), 7.75-7.81 (м, 2H) и 8.53-8.59 (м, 1H, Ar); 9.34 (yш.с, 1H, NH).

ԲԵՆԶՈ[4,5]ԻՄԻԴԱԶՈ[2',1':6,1]ՊԻՐԻԴՈ[2,3-d]ՊԻՐԻՄԻԴԻՆԻ ՆՈՐ ԱԾԱՆՅՅԱԼՆԵՐ

Ա. Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Ն. Ա. ՓԱՆՈՍՅԱՆ,
Ռ. Ա. ԹԱՄԱԶՅԱՆ և Ա. Գ. ԱՅՎԱԶՅԱՆ

Պոլիֆոսֆորական թթվում էկվիմոլյար քանակի ZnCl₂ -ի ներկայությամբ 2-մեթիլ-3-(6-մեթիլ-4-օքսո-2-թիօքսո-1,2,3,4-տետրահիդրո-5-պիրիմիդինիլ)պրոպանաթթվի և 1,2-բենզոլդիամինի փոխազդեցության արդյունքում սինթեզվել է 4,6-դիմեթիլ- 5,6-դիհիդրո-բենզո[4',5']իմիդազո[2',1':6,1]պիրիդո[2,3-d]պիրիմիդին-2-հիդրոսուլֆիդ, որը այնուհետև վերածվել է համապատասխան դիսուլֆիդի և տեղակալված 2-բենզիլսուլֆանիլ-ածանցյալի: Նախկինում մեր կողմից սինթեզված տեղակալված 5,6-դիհիդրոբենզո[4',5']իմիդազո[2',1':6,1]պիրիդո[2,3-d]պիրիմիդին-2-ոլը և 2-թիոլը վեր են ածվել համապատասխանա 2-քլոր-, -ամինո-, մեթիլամինո- և ֆենիլամինոածանցյալների և 2-(2'-քլորբենզիլ)սուլֆանիլածանցյալի: Բոլոր սինթեզված միացությունների կառուցվածքն ապացուցվել է ՄՄՌ-սպեկտրոսկոպիայի, իսկ 2-քլորածանցյալը նաև ռենտգենոկառուցվածքային անալիզի մեթոդներով:

NEW DERIVATIVES OF THE BENZO[4,5]IMIDAZO[2'1':6,1]PYRIDO [2,3-d]PYRIMIDINE

A. A. HARUTYUNYAN^a, H. A. PANOSYAN^б, R. A. TAMAZYAN^б and A. G. AYVAZYAN^б

^a The Scientific Technological Centre of Organic
and Pharmaceutical Chemistry NAS RA

A. L. Mnjoyan Institute of Fine Organic Chemistry

^б Molecule Structure Research Centre NAS RA

26, Azatutyan Str., Yerevan, 0014, Armenia

E-mail: harutyunyan.arthur@yahoo.com

By condensation of 2-methyl-3-(6-methyl-4-oxo-2-thioxo-1,2,3,4-tetrahydro-5-pyrimidinyl)propanoic acid with 1,2-benzenediamine in polyphosphoric acid (PPA) with equimolecular quantity of ZnCl₂, 4,6-dimethyl-5,6-dihydrobenzo[4',5']imidazo[2',1':6,1]pyrido[2,3-d]pyrimidine-2-hydrosulfide was synthesized. The latter was transformed to the corresponding disulfide and substituted 2-benzylsulfanyl derivatives. Previously synthesized substituted 4,6-dimethyl-5,6-dihydrobenzo[4',5']imidazo[2',1':6,1]pyrido[2,3-d]pyrimidin-2-ol- and thiol were transformed subsequently to the 2-chloro-, amino-, methylamino- and phenylaminoderivatives and 2-(2'-chlorobenzyl)sulfanyl derivative. The structures of synthesized compounds were established by the NMR-spectroscopy, and that of 2-chloroderivative – also by X-ray analysis.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Арутюнян А.А. // ЖОрХ, 2016, т. 52, №2, с. 252.
- [2] Арутюнян А.А. // ЖОрХ, 2014, т. 50, №1, с. 100.
- [3] North A. C. T., Phillips D. C., Mathews F. S. // Acta Crystallografica, 1968, A24, p.351, doi: 10.1107/S0567739468000707.
- [4] Sheldrick G.M. // Acta Crystallografica, 2015, C71, p. 3. doi: 10.1107/S2053229614024218.