



УДК 547.856.1

СИНТЕЗ ОРТО-R-ФЕНИЛ БЕНЗИМИДАЗОЛОГЕКСАГИДРОХИНАЗОЛИНОВ С УГЛОВЫМ СОЧЛЕНЕНИЕМ КОЛЕЦ

М. А. Ивонин, Д. К. Дымолазова,
В. В. Сорокин, А. П. Кривенько

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского
E-mail: ivonin.m@list.ru

Конденсация 2-аминобензимидазола, орто-замещенных бензальдегидов и циклогексанона протекает с образованием 10-орто-R-фенилзамещенных бенз[4,5]имидазоло-6,7,8,9,10,11-гексагидро[1,2-а]хиназолинов, имеющих угловое сочленение колец, строение которых установлено с помощью ЯМР ^1H , ^{13}C спектров.

Ключевые слова: 2-аминобензимидазол, орто-замещенные бензальдегиды, бензимидазолохиназолины, трехкомпонентная конденсация, ИК, ЯМР ^1H , ^{13}C спектры.

Synthesis of Opto-R-Phenyl Benzimidazoloheksahydroquinazoline with Angular Articulation Rings

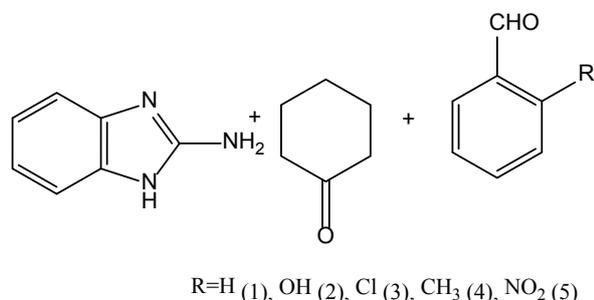
М. А. Ivonin, D. C. Dymolazova,
V. V. Sorokin, A. P. Kriven'ko

Condensation of 2-aminobenzimidazole, ortho-substituted benzaldehydes and cyclohexanone proceeds with the formation of 10-o-R-substituted phenyl benz[4,5]imidazo-6,7,8,9,10,11-hexahydro[1,2-a]quinazolines having angular articulation rings, structure which is set using IR, NMR, ^1H , ^{13}C spectra.

Keywords: 2-aminobenzimidazole, ortho-substituted benzaldehydes, three component condensation, benzimidazoquinazolines, positional isomers, NMR ^1H , ^{13}C , IR spectroscopy.

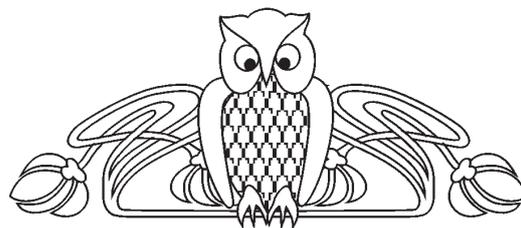
DOI: 10.18500/1816-9775-2016-16-4-370-371

Синтез соединений бензимидазолохиназолинового ряда описан в немногочисленных публикациях и основывается на взаимодействии



Выходы продуктов колеблются от 84 до 40% в зависимости от характера заместителя в альдегидной компоненте.

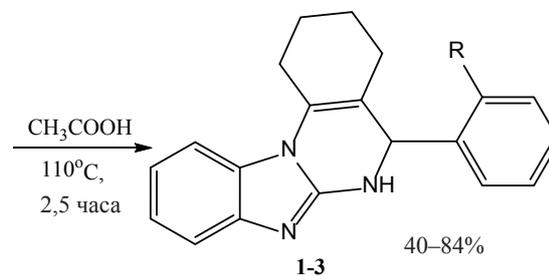
Можно полагать, что формирование бензи-



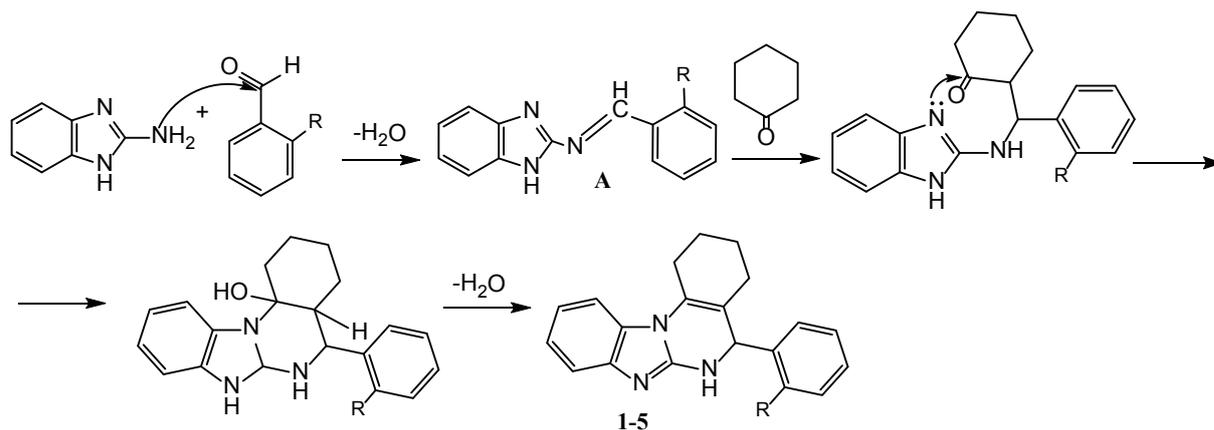
2-аминобензимидазолов с дикарбонильными соединениями [1, 2]. Нами впервые с целью синтеза новых представителей этого ряда, выявления особенностей их образования и изучения фармакологической активности, осуществлена трёхкомпонентная конденсация 2-аминобензимидазола, замещенных бензальдегидов, содержащих в орто-положении электронодонорные (CH₃, OH), электроноакцепторные (Cl, NO₂) группы и циклогексанона. Реакция протекает полностью селективно при кипячении эквимольных соотношений реагентов в растворе ледяной уксусной кислоты и приводит к образованию ранее неизвестных орто-R- бензимидазологексагидрохиназолинов 1–5 (таблица).

Температуры плавления и выходы бензимидазологексагидрохиназолинов 1–5

№ соединения	Значения R	Тпл, °С	Выход, %
1	H	166–172	84
2	OH	190–193	81
3	Cl	203–205	40
4	CH ₃	215–218	55
5	NO ₂	200–203	45



мидазологексагидрохиназолинов 1–5 протекает через альдимин А, его последующую конденсацию с циклогексаноном, азицилизацию и дегидратацию:



Образование продуктов с угловым сочленением колец существенно отличается конденсацию с участием 2-аминобензимидазола от аналогичной реакции, где роль гетероциклического амина выполняет *S*-аминотетразол. В последнем случае первоначально возникающие угловые изомеры претерпевают перегруппировку в термодинамически более стабильные изомеры линейного строения, содержащие 1,4-дигидропиримидиновый фрагмент. Последние выделены в чистом виде при термической обработке (150–160°C) смеси изомеров [3]. Полученные нами результаты являются примером образования полигетероатомных гетероциклов с угловым сочленением колец, содержащих узловой атом азота. Попытка изомеризовать полученные бензимидазологексагидрохиназолины **1–5** посредством термического воздействия (150°C, 2 ч) оказалась безуспешной, что, вероятно, можно объяснить трудностью разрыва связи C_{4a}-N₅ (по сравнению со связью N-N в тетразолсодержащих системах), ответственную за изомеризацию.

Состав и строение полученных 10-орто-*R*-фенилзамещенных бенз[4,5]имидазоло-6,7,8,9,10,11-гексагидро[1,2-*a*]хиназолинов **1–5** подтверждено данными элементного анализа, ИК, ЯМР ¹H, ¹³C спектров. В ИК-спектрах присутствуют полосы валентных колебаний связей NH (3350–3444 см⁻¹), C=N (1615–1637 см⁻¹), ароматических колец (1455–1600 см⁻¹). В ЯМР

¹H спектрах имеются синглеты метиновых протонов H¹⁰ (6.26–6.35 м.д.) и NH протонов (10.35–10.49 м.д.), мультиплеты протонов алицикла (1.2–2.5 м.д.), а также бензольного кольца (6.88–7.25 м.д.) и арильного заместителя (7.35–7.77 м.д.). Положение двойной связи C7a-C9a подтверждается отсутствием сигналов винильных протонов. В ЯМР ¹³C спектрах количество и характер сигналов соответствует предложенному строению.

Наличие в полученных соединениях фармакофорного имидазопиримидинового фрагмента при варьировании арильных заместителей создает перспективу изучения их фармакологической активности.

Список литературы

1. Petrova O. N., Zamigajlo L. L., Shishkin O. V. Multicomponent reaction of 2-aminobenzimidazole, arylglyoxals and 1,3-cyclohexanedione // Chem. of Heterocycl. Compounds. 2015. Vol. 51, iss. 4. P. 310–319.
2. Lipson V. V., Desenko S. M., Shishkina S. V., Shirobokova M. G., Shishkin O. V., Orlov V. D. Cyclocondensation of 2-aminobenzimidazole with dimedone and its arylidene derivatives // Chem. of Heterocycl. Compounds. 2003. Vol. 39, iss. 8. P. 1041–1047.
3. Василькова Н. О., Филимонова В. Н., Кривенько А. П. Термическая изомеризация *o*-хлорфенилтетразолоцикланопиримидинов с различным типом сочленения // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология. 2016. Т. 16, вып. 4. С. 367–369.

Образец для цитирования:

Ивонин М. А., Дымолазова Д. К., Сорокин В. В., Кривенько А. П. Синтез орто-*г*-фенил бензимидазоло-гексагидрохиназолинов с угловым сочленением колец // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология. 2016. Т. 16, вып. 4. С. 370–371. DOI: 10.18500/1816-9775-2016-16-4-370-371.