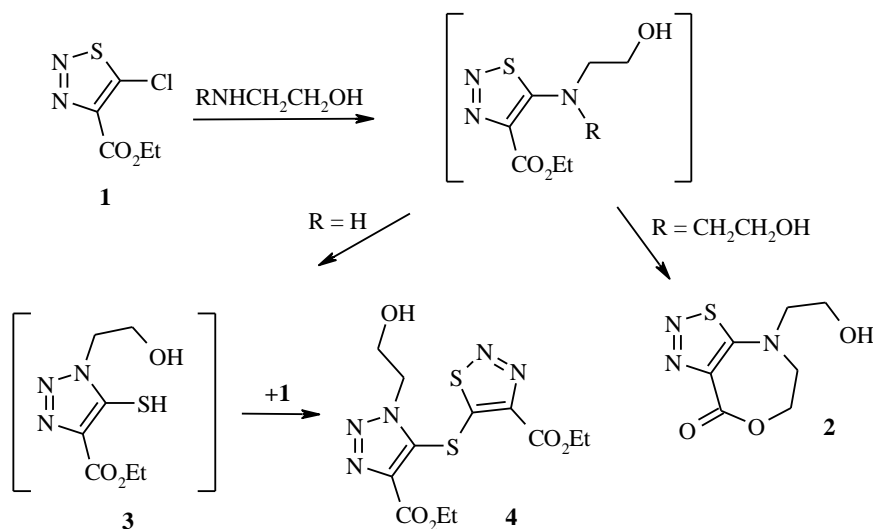


**СИНТЕЗ**  
**5,6-ДИГИДРО[1,2,3]ТИАДИАЗОЛО[5,4-*e*][1,4]ОКСАЗЕПИН-8(4)-ОНА**

**Ключевые слова:** оксазепин, 1,2,3-триазол, перегруппировка Димрота.

Реакция нуклеофильного замещения в ряду 5-галогено-1,2,3-тиадиазолов является удобным методом синтеза различных гетероциклов [1, 2]. Ранее нами было показано, что подобная реакция может сопровождаться перегруппировкой тиadiaзольного цикла, а также реакциями по сложноэфирной группе в положении 4 цикла [3, 4]. В продолжение наших исследований мы разработали простой препаративный метод синтеза ранее неизвестной гетероциклической системы [1,2,3]тиадиазоло[5,4-*e*]-[1,4]оксазепина реакцией этилового эфира 5-хлор-1,2,3-тиадиазол-4-карбоновой кислоты (**1**) [5] с диэтаноломином. В результате взаимодействия происходит нуклеофильное замещение атома хлора, затем внутримолекулярная переэтерификация сложноэфирной группы с образованием гетероцикла **2**. В отличие от указанной выше реакции, взаимодействие тиadiaзола **1** с моноэтаноломином приводит к продукту [6] перегруппировки Димрота 5-меркапто-1,2,3-триазолу **3**, который в условиях проведения реакции реагирует с исходным 5-хлор-1,2,3-тиадиазолом **1** с образованием сульфида **4**.



Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  сняты на приборе Bruker DRX-400 (400 и 100 МГц соответственно) в  $\text{DMSO-d}_6$ , внутренний стандарт ТМС.

**4-(2-Гидроксиэтил)-5,6-дигидро[1,2,3]тиадиазоло[5,4-*e*][1,4]оксазепин-8(4H)-он (2).** К раствору 0.385 г (2 ммоль) соединения **1** в 25 мл этанола (96%) добавляют 0.42 г (4 ммоль) свежеперегнанного диэтанолamina, перемешивают 4 ч при комнатной температуре, растворитель упаривают в вакууме, остаток кристаллизуют из этанола. Выход 0.38 г (87%). Т. пл. 152–153 °С. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 5.05 (1H, т,  $J = 6.0$ , OH); 4.54–4.56 (2H, м,  $\text{OCH}_2$ ); 3.84–3.86 (2H, м,  $\text{NCH}_2$ ); 3.66 (2H, д, т,  $J = 6.0$ ,  $J = 5.2$ ,  $\text{CH}_2\text{OH}$ ); 3.46 (2H, т,  $J = 5.2$ ,  $\text{NCH}_2$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ , 167.3, 162.4, 132.5, 64.7, 64.3, 57.2, 54.5. Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %) 215 (100). Найдено: С 38.89; Н 4.37; N 19.20; S 14.72.  $\text{C}_7\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_3\text{S}$ . Вычислено: С 39.06; Н 4.21; N 19.52; S 14.90.

**Этиловый эфир 5-(1-(2-гидроксиэтил)-4-(этоксикарбонил)-1H-1,2,3-триазол-5-илтио)-1,2,3-тиадиазол-4-карбоновой кислоты (4).** Выход 0.28 г (38%). Масло. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 4.62 (1H, уш. с, OH); 4.42 (2H, к,  $J = 7.1$ ,  $\text{OCH}_2$ ); 4.36 (2H, к,  $J = 7.0$ ,  $\text{OCH}_2$ ); 4.25 (2H, д, т,  $J = 6.0$ ,  $J = 6.0$ ,  $\text{CH}_2\text{OH}$ ); 4.16 (2H, т,  $J = 6.0$ ,  $\text{NCH}_2$ ); 1.38 (3H, т,  $J = 7.1$ ,  $\text{CH}_3$ ); 1.18 (3H, т,  $J = 7.0$ ,  $\text{CH}_3$ ). Найдено: С 38.55; Н 4.07; N 19.00; S 17.11.  $\text{C}_{12}\text{H}_{15}\text{N}_5\text{O}_5\text{S}_2$ . Вычислено: С 38.60; Н 4.05; N 18.76; S 17.17.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных*

исследований (грант p2004\_04-03-96104-p2004урал\_a).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. B. Modarai, M. H. Ghauderhari, H. Massoumi, A. Shafiee, J. Lalezari, A. Badali, *J. Heterocycl. Chem.*, **11**, 343 (1974).
2. V. Bakulev, W. Dehaen, *The Chemistry of 1,2,3-thiadiazoles*, J. Wiley&Sons, USA, 2004.
3. Ю. Ю. Моржерин, Т. А. Поспелова, Т. В. Глухарева, В. С. Берсенева, Ю. А. Розин, Е. В. Тарасов, В. А. Бакулев, ХГС, 1388 (2001). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **37**, 1270 (2001)].
4. Е. В. Тарасов, Ю. Ю. Моржерин, В. А. Бакулев, ХГС, 1698 (1995). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **31**, 1476 (1995)].
5. J. Goerdeler, G. Gnad, *Chem. Ber.*, **99**, 1618 (1966).
6. G. L'abbe, E. Verstedde, *J. Heterocycl. Chem.*, **26**, 1811 (1989).

**П. Е. Кропотина, Т. В. Глухарева, И. С. Исакова,  
Е. А. Алексеева<sup>а</sup>, Ю. Ю. Моржерин**

Уральский государственный  
технический университет – УПИ,  
Екатеринбург 620002, Россия  
e-mail: morzherin@mail.ustu.ru

Поступило 25.01.2008

<sup>а</sup>Физико-химический институт  
им. А. В. Богатского НАН Украины,  
Одесса 650080  
e-mail [Alyeksyeyeva@rambler.ru](mailto:Alyeksyeyeva@rambler.ru)

ХГС. – 2008. – № 2– С. 300