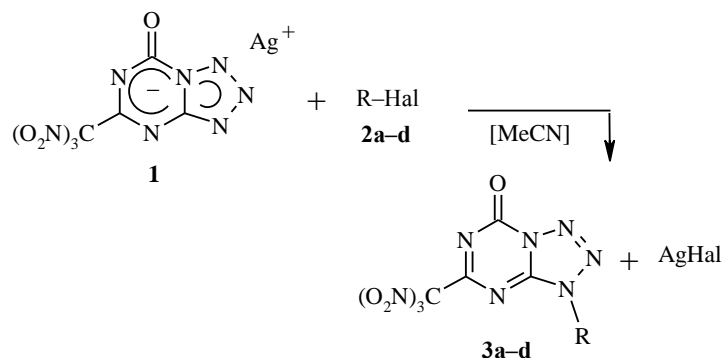


КОНДЕНСИРОВАННЫЕ ТЕТРАЗОЛО-1,3,5-ТРИАЗИНЫ

3*. СИНТЕЗ 3-R-5-ТРИНИТРОМЕТИЛТЕТРАЗОЛО[1,5-a]- 1,3,5-ТРИАЗИН-7-ОНОВ

Ключевые слова: серебряная соль 5-тринитрометилтетразоло[1,5-a]-1,3,5-триазин-7-она, 3-R-5-тринитрометилтетразоло[1,5-a]-1,3,5-триазин-7-оны, алкилирование.

Продолжая исследования свойств новой гетероциклической системы тетразола[1,5-a]-1,3,5-триазин-7-она [1, 2], мы изучили алкилирование серебряной соли 5-тринитрометилтетразоло[1,5-a]-1,3,5-триазин-7-она (**1**) с использованием различных по строению алкилирующих агентов. Было установлено, что взаимодействие серебряной соли **1** с галогенпроизводными **2a-d** приводит во всех исследованных случаях к образованию соответствующих 3-R-5-тринитрометилтетразоло[1,5-a]-1,3,5-триазин-7-онов **3a-d**.



2 a R = *i*-Pr, Hal = I; b R = (CH₂)₄Me, Hal = I; c R = Bn, Hal = Cl; d R = CH₂COAd, Hal = Br; 3 a R = *i*-Pr; b R = (CH₂)₄Me; c R = Bn; d R = CH₂COAd

Таким образом, несмотря на различие в строении алкильного радикала и уходящей группы (Cl, Br, I), были выделены продукты алкилирования по атому N₍₃₎ тетразольного цикла, как и в случае алкилирования серебряной соли **1** метилиодидом [2].

ИК спектры записаны на спектрофотометре Avatar 360 ESP в таблетках KBr. Спектры ЯМР ¹H записаны на спектрометре Bruker AM-300 (300 МГц) в CDCl₃, внутренний стандарт ТМС.

3-R-5-Тринитрометилтетразоло[1,5-a]-1,3,5-триазин-7-оны 3a-d. К суспензии 1.18 г (3 ммоль) серебряной соли **1** в 30 мл ацетонитрила добавляют 3.0–3.6 ммоль соответствующего галогенпроизводного **2a-d**. Реакционную массу перемешивают при температуре 20–25 °С до исчезновения соединения **1**, по данным ТСХ (24–72 ч). Выпавший в осадок соответствующий галогенид серебра отфильтровывают, из фильтрата отгоняют растворитель при пониженном давлении с использованием ротационного испарителя. Остаток обрабатывают 10 мл холодного гексана, кристаллический продукт отфильтровывают.

Соединение 3a. Выход 76%, т. пл. 88–89 °С. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3104, 3004, 2960, 2892, 1776, 1612, 1534, 1464, 1404, 1340, 1298, 1214, 1194, 1170, 1138, 1122, 1040, 996, 924, 884, 844, 802, 774. Спектр ЯМР ¹H, δ , м. д. (*J*, Гц): 1.62 (6H, д, *J* = 4.8, CH₃); 4.97 (1H, м, CH). Найдено, %: С 25.62; Н 2.27; N 38.18. С₇H₇N₉O₇. Вычислено, %: С 25.54; Н 2.14; N 38.29.

Соединение 3b. Выход 84%, т. пл. 61–62 °С. ИК спектр, ν , см⁻¹: 2968, 2936, 2872, 1760, 1620, 1600, 1528, 1474, 1392, 1296, 1156, 1070, 924, 844, 802, 776. Спектр ЯМР ¹H (CDCl₃), δ , м. д. (*J*, Гц): 0.86 (3H, т, *J* = 7.2, CH₃); 1.30 (4H, м, CH₂); 1.98 (2H, т, *J* = 6.0, CH₂); 4.48 (2H, т, *J* = 6.4, CH₂). Найдено, %: С 30.19; Н 3.17; N 35.36. С₉H₁₁N₉O₇. Вычислено, %: С 30.26; Н 3.10; N 35.29.

* Сообщение 2 см. [1].

Соединение 3c. Выход 72%, т. пл. 79–81 °С. ИК спектр, ν , см⁻¹: 3032, 2936, 2898, 1772, 1626, 1604, 1562, 1544, 1532, 1462, 1422, 1360, 1344, 1284, 1252, 1212, 1116, 1072, 1042, 1018, 980, 928, 850, 842, 798, 776. Спектр ЯМР ¹H, δ , м. д.: 5.60 (2H, с, CH₂); 7.34 (5H, с, C₆H₅). Найдено, %: С 34.95; Н 1.95; N 33.40. С₁₁H₇N₉O₇. Вычислено, %: С 35.02; Н 1.87; N 33.42.

Соединение 3d. Выход 69%, т. пл. 141–143 °С. ИК спектр, ν , см⁻¹: 2924, 2860, 1776, 1728, 1638, 1598, 1564, 1532, 1478, 1464, 1418, 1340, 1294, 1210, 1176, 1150, 1126, 1084, 1022, 984, 968, 948, 924, 848, 802, 772. Спектр ЯМР ¹H (CDCl₃), δ , м. д.: 1.74, 1.86 и 2.08 (15H, м, Ad); 5.43 (2H, с, CH₂). Найдено, %: С 41.39; Н 3.78; N 27.29. С₁₆H₁₇N₉O₈. Вычислено, %: С 41.47; Н 3.70; N 27.21.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Б. С. Федоров, А. Н. Утёнышев, А. А. Гидаспов, Е. В. Качановская, В. В. Бахарев, М. А. Фадеев, *XTC*, 582 (2005).
2. Б. С. Федоров, М. А. Фадеев, А. А. Гидаспов, Е. А. Косарева, В. В. Бахарев, *XTC*, 259 (2005).

В. В. Бахарев, А. А. Гидаспов

Поступило в редакцию 01.02.2006

*Самарский государственный технический
университет, Самара 443100, Россия
e-mail: knii@sstu.smr.ru*

ХГС. – 2006. – № 3. – С. 466
