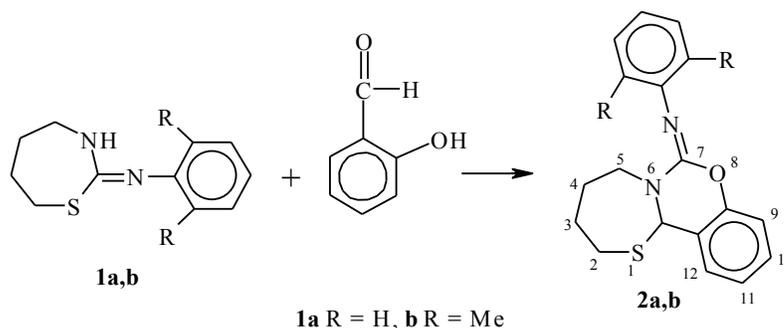


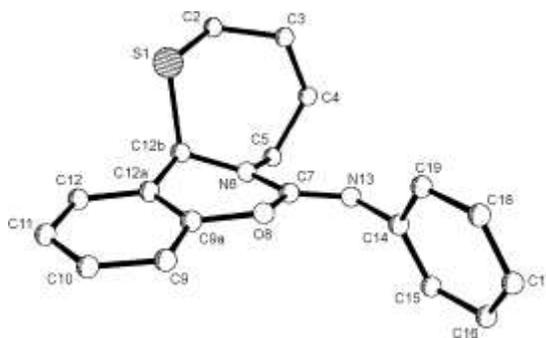
2,3,4,5-ТЕТРАГИДРО-7Н,12bН-1,3-ТИАЗЕПИНО[3,2-с]-1,3-БЕНЗОКСАЗИН – НОВАЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКАЯ СИСТЕМА

Ключевые слова: 2-арилиминогексагидро-1,3-тиазепины, салициловый альдегид, 2,3,4,5-тетрагидро-7Н,12bН-1,3-тиазепино[3,2-с]-1,3-бензоксазин.

Производные 2-аминотиазепина и его гидрированных аналогов до сих пор остаются малоизученной группой органических соединений, хотя они являются удобными синтонами для получения потенциальных биологически активных веществ. В продолжение наших работ по изучению химического поведения и спектральных свойств 2-аминотетрагидро- и 2-иминогексагидро-1,3-тиазепинов [1, 2] исследовано взаимодействие соединений **1a,b** с салициловым альдегидом и вместо ожидаемых бис-(N-арил-N-гексагидротиазепиниламино)-2-гидроксибензилметанов получены производные новой гетероциклической системы – 2,3,4,5-тетрагидро-7Н,12bН-1,3-тиазепино[3,2-с]-1,3-бензоксазина (соединения **2a,b**).



Это превращение протекает при эквимольном соотношении реагентов и длительном нагревании в изоамиловом спирте. Строение синтезированных соединений подтверждено на примере соединения **2a** рентгено-структурным анализом.



Молекулярная структура соединения **2a**

Рентгеноструктурное исследование строения гетероцикла **2a** показало, что экзоциклическая связь $C_{(7)}-N_{(13)}$ (1.266 Å) заметно укорочена по сравнению с эндоциклической связью $C_{(12b)}-N_{(6)}$ (1.363 Å) и ближе к формально двойной связи $C=N$ (1.265 Å). Среднее значение длин связей $C_{sp^3}-C_{sp^3}$ и $C_{аром}-C_{аром}$ 1.519 и 1.383 соответственно, т. е. они несколько укорочены по сравнению с принятыми стандартами.

7-Фенилимино-2,3,4,5-тетрагидро-7Н,12bН-1,3-тиазепино[3,2-с]-1,3-бензоксазин (2a). Выход 41.3%. Т. пл. 133–134 °С (из этанола). ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1590 (C=C), 1657 (C=N), 2952, 3015 (Ph). Масс-спектр, m/z ($I_{отн.}$, %): M^+ 310 (38). Найдено, %: C 69.42; H 5.80; N 9.17. $C_{18}H_{18}N_2OS$. Вычислено, %: C 69.65; H 5.84; N 9.02.

7-(2¹,6¹-Диметилфенилимино)-2,3,4,5-тетрагидро-7Н,12bН-1,3-тиазепино[3,2-с]-1,3-бензоксазин (2b). Выход 59.2%. Т. пл. 136.5–137.5 °С (из водного этанола). ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1589 (C=C), 1669 (C=N), 2955, 3046 (Ar). Масс-спектр, m/z ($I_{отн.}$, %): 338(37). Найдено, %: C 70.68; H 6.51; N 8.34. $C_{20}H_{22}N_2OS$. Вычислено, %: C 70.97; H 6.55; N 8.28.

Рентгеноструктурный анализ соединения 2a. Параметры элементарных ячеек и пространственные группы определены и уточнены на дифрактометре Siemens: $a = 13.514(4)$, $b = 10.142(2)$, $c = 12.010(3)$ Å, $\beta = 110.26(2)^\circ$, $V = 1544.1(7)$ Å³, $d_{\text{выч}} = 1.335$ г/см³, пространственная группа $P2_1/c$, $Z = 4$. Окончательное значение фактора расходимости по отражениям $I > 2\theta(I)$, $R_1 = 0.0348$, $wR_2 = 0.1090$, по всем отражениям $R_1 = 0.0348$, $wR_2 = 0.1090$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Р. Ф. Амбарцумова, М. Г. Левкович, Н. Д. Абдуллаев, *ХГС*, 416 (1997).
2. Р. Ф. Амбарцумова, Б. Ташходжаев, М. К. Махмудов, *ХГС*, 554 (1997).

Р. Ф. Амбарцумова, Б. Ташходжаев

*Институт химии растительных веществ
АН Республики Узбекистан,
Ташкент 700170
e-mail: shakhi@icps.org.uz*

*Поступило в редакцию 18.09.2000
После доработки 16.03.2001*

ХГС. – 2001. – № 8. – С. 1144