Бензилиденкетоны в синтезе замещённых бензимидазолопиримидинов

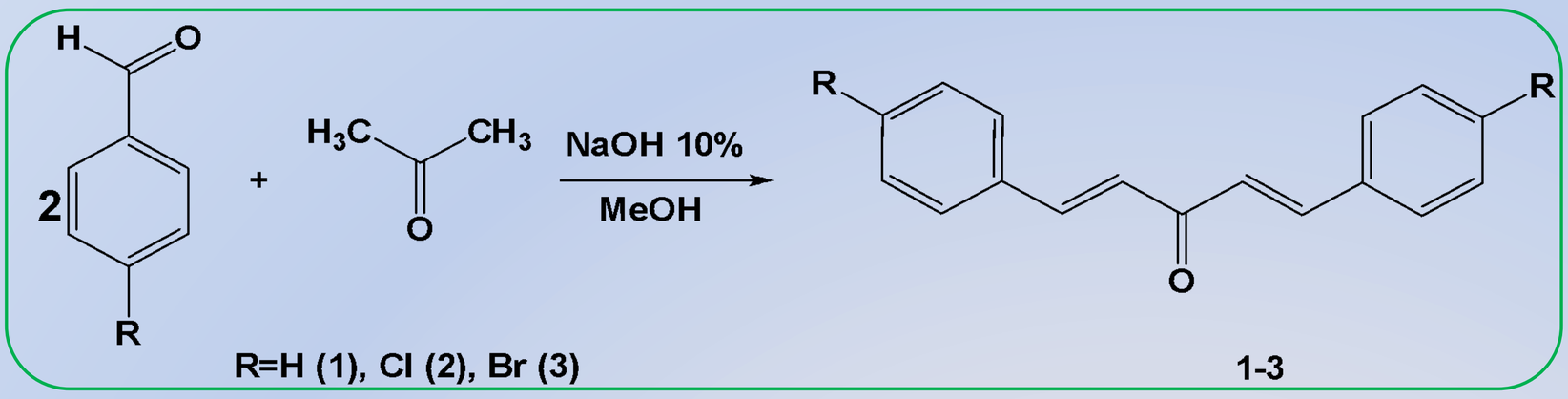
Студенты: Неверов А.В. (2 курс), Шокин А.А. (2 курс)
Научный руководитель: д.х.н., проф. Сорокин В.В.

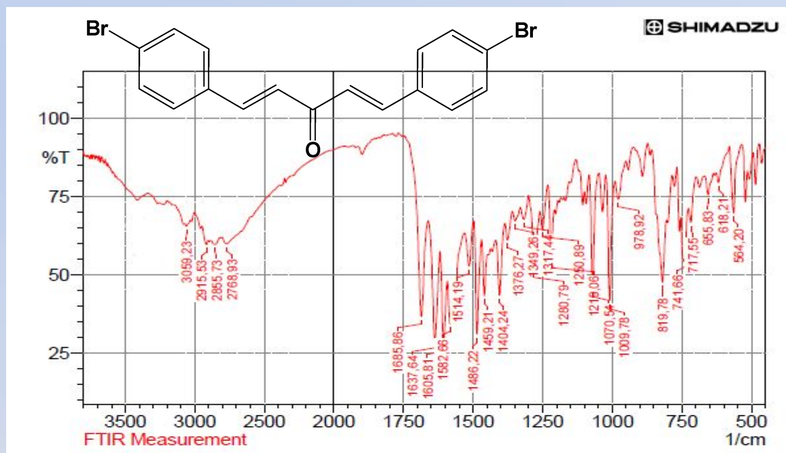
Цель:

- Синтез бисарилметиледеновых производных и исследование их превращения с гетариламином (2-аминобензимидазол)

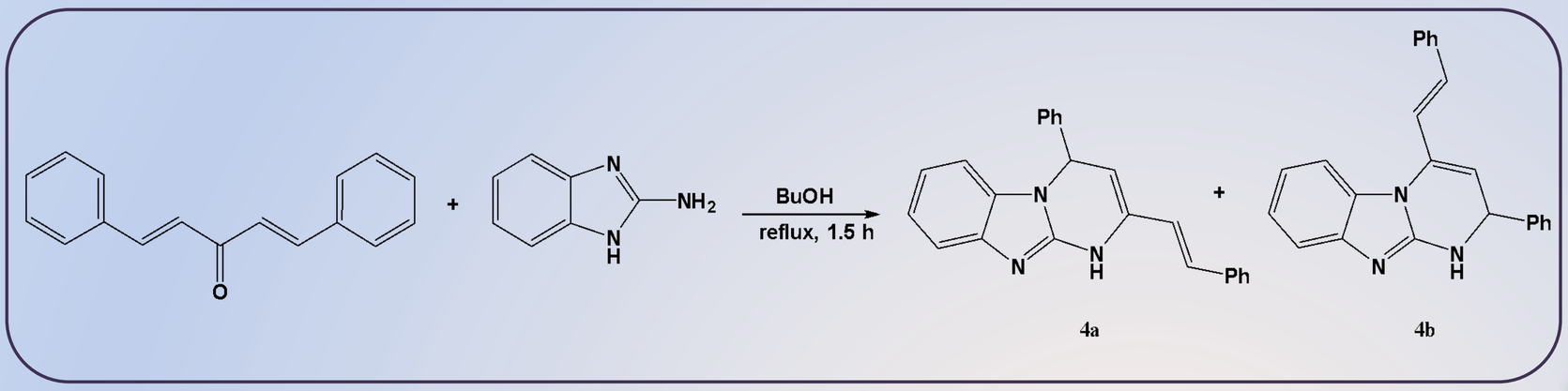
Задачи:

- Получение замещенных дибензилиденацетонов конденсацией ацетона с замещенными ароматическими альдегидами
- Проведение двухкомпонентной конденсации дибензилиденацетона с 2-аминобензимидазолом
- Установление состава и строения продуктов реакций.



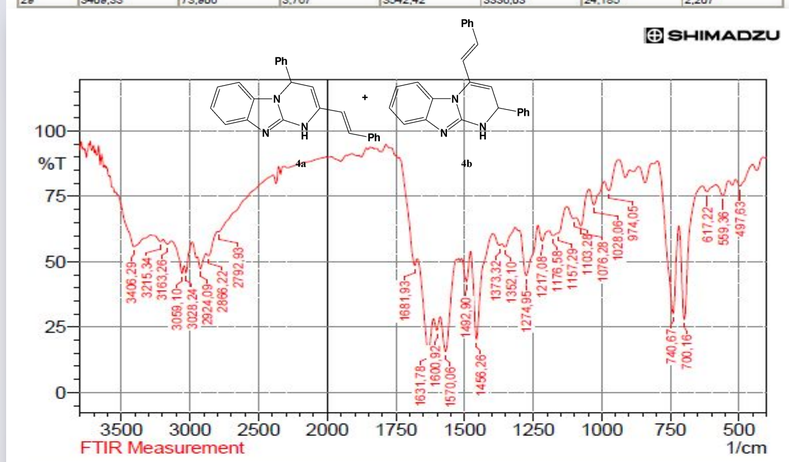


No.	Пик	Интенсивн.	Корр. интенсивн	База (H)	База (L)	Площадь	Корр. площади
1	564,2	89,655	21,454	578,67	536,23	3,452	1,763
2	618,21	79,447	4,739	626,89	579,63	3,282	0,382
3	655,83	75,48	6,403	669,33	637,5	3,232	0,482
4	717,55	66,883	7,704	728,23	698,26	3,727	0,463
5	741,66	54,899	1,081	742,63	727,19	3,117	0,103
6	819,78	47,612	20,64	940,04	805,32	8,344	2,611
7	978,92	74,143	7,552	989,53	951,91	3,736	0,712
8	1009,78	41,551	39,568	1023,28	990,49	6,292	3,274
9	1070,54	45,491	36,646	1083,08	1048,36	5,834	2,884
10	1219,06	54,605	19,884	1230,64	1208,46	4,157	1,307
11	1250,89	64,458	8,111	1258,61	1231,6	4,123	0,662
12	1280,79	51,577	21,37	1300,08	1259,57	7,94	2,335
13	1317,44	67,719	5,502	1329,98	1301,04	4,443	0,576
14	1349,26	67,165	3,466	1357,94	1330,94	4,375	0,341
15	1376,27	61,087	6,616	1384,95	1358,91	4,874	0,575
16	1404,24	43,478	19,856	1417,74	1385,91	8,282	2,062
17	1459,21	43,346	15,805	1468,86	1447,64	6,146	1,249
18	1486,22	30,81	34,117	1496,83	1469,82	8,838	3,622
19	1514,19	52,783	12,374	1528,65	1497,79	7,043	1,335
20	1582,66	34,435	11,723	1592,31	1567,23	9,955	1,363
21	1605,81	28,177	24,518	1618,35	1593,27	10,253	3,194
22	1637,64	29,058	32,57	1659,82	1619,31	13,928	5,456
23	1685,86	36,76	38,758	1741,8	1660,78	14,116	6,169
24	2768,93	59,936	2,543	2803,65	2666,7	28,816	1,296
25	2855,73	59,72	1,564	2879,85	2820,05	13,091	0,417
26	2915,53	59,675	2,466	2946,39	2904,92	8,735	0,458
27	3059,23	65,511	1,175	3070,81	3031,26	7,062	0,164
28	3079,49	72,662	0,906	3335,07	3253,09	10,534	0,114
29	3409,33	73,906	3,767	3542,42	3336,03	24,185	2,207



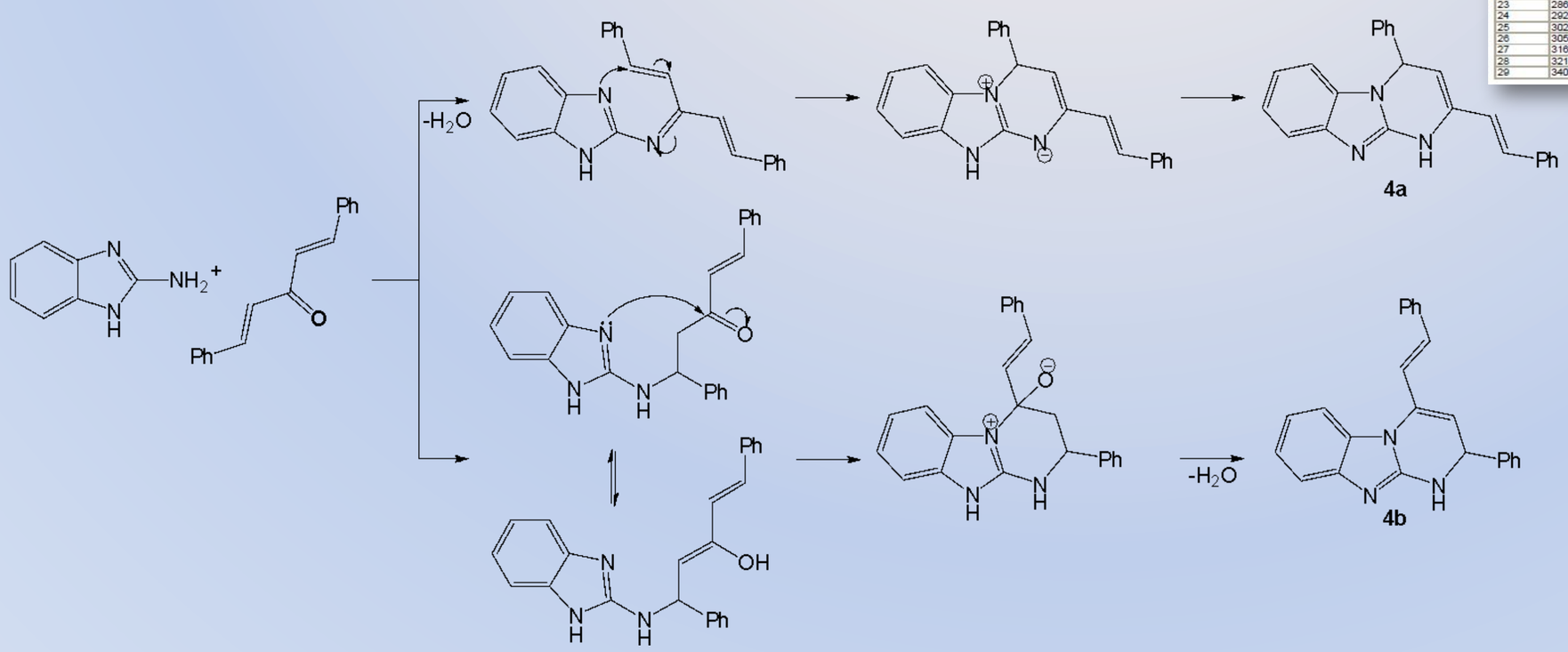
Продукт реакции	Условия перекристализации	Т пл., ^{o}C	Выход, %
1	Гексан/бензол 50/50	110-112	90
2	Гексан/бензол 50/50	185-187	75
3	Гексан/бензол 50/50	210-211	66
4a-b	Этанол	205-210	63

ИК υ, $см^{-1}$ (валентные колебания, ν)					
Продукт реакции	NH	C_{sp2}-H	Ar-H	C_{sp3}-H	C=O
3	-	2915+2855	3059+3062	-	1685
4a-b	3215+3163	2924	3028+3058	2866	-



No.	Пик	Интенсивн.	Корр. интенсивн	База (H)	База (L)	Площадь	Корр. площади
1	497,63	78,963	3,834	511,14	451,34	5,049	0,66
2	559,36	75,288	4,997	582,5	538,14	4,83	0,598
3	617,22	76,817	2,367	632,65	584,43	5,149	0,286
4	700,16	27,889	39,307	719,45	634,58	20,033	7,636
5	740,67	29,99	39,667	796,6	721,38	20,197	10,585
6	974,05	77,227	6,053	989,48	939,33	4,247	0,718
7	1028,06	71,809	6,575	1045,42	991,41	6,502	1,049
8	1076,28	63,705	6,906	1091,71	1047,35	7,053	0,827
9	1103,28	66,468	1,641	1128,43	1093,64	5,507	0,191
10	1157,29	60,913	0,638	1159,22	1128,36	5,535	0,086
11	1176,58	59,934	1,422	1192,01	1163,08	6,301	0,162
12	1217,08	57,903	5,202	1232,51	1193,94	8,448	0,663
13	1274,95	44,679	17,909	1300,02	1234,44	18,311	5,064
14	1352,1	55,703	2,627	1363,67	1315,45	11,086	0,402
15	1373,32	56,295	1,534	1394,53	1365,6	6,91	0,194
16	1456,26	20,255	35,505	1477,47	1396,46	29,843	10,286
17	1492,9	42,411	10,082	1508,33	1479,4	9,519	1,417
18	1570,06	15,695	19,829	1587,42	1529,55	31,465	7,723
19	1600,92	23,652	4,953	1612,49	1589,34	13,532	0,961
20	1631,78	16,077	19,109	1670,35	1614,42	31,166	7,343
21	1681,93	48,614	8,271	1737,86	1672,28	11,936	1,098
22	2283,72	61,509	0,108	2794,85	2393,66	54,205	0,047
23	2866,22	52,238	2,451	2881,65	2796,78	21,074	0,704
24	2924,09	47,345	4,963	2945,3	2883,58	18,5	1,244
25	3028,24	45,679	5,057	3041,74	2985,81	16,196	0,815
26	3059,1	45,487	4,638	3134,33	3043,67	25,562	0,816
27	3163,26	56,77	1,452	3194,12	3136,25	13,937	0,347
28	3215,34	57,722	1,238	3257,77	3196,05	14,326	0,281
29	3406,29	55,758	12,142	3523,95	3288,63	50,182	9,858

Схемы образования изомерных бензимидазолопиримидинов 4a-b



Выводы:

1. Конденсацией ацетона с замещенными ароматическими альдегидами получены *пара-* замещенные дибензилиденацетоны с хорошими выходами.
2. Двухкомпонентной конденсацией дибензилиденацетона с 2-аминобензимидазолом была получена изомерная смесь 4-фенил-2-стирил-1,4-дигидробензо[4,5]имидазоло[1,2-a]пиримидина 4a и 2-фенил-4-стирил дигидробензо[4,5]имидазоло [1,2-a]пиримидина 4b образование которой вероятно вызвано разным направлением первоначальной нуклеофильной атаки, по карбонильному углероду либо как сопряженное 1,4-присоединение по фрагменту C=C-C=O.