

Бензилиденкетоны в синтезе замещённых бензимидазолопиримидинов



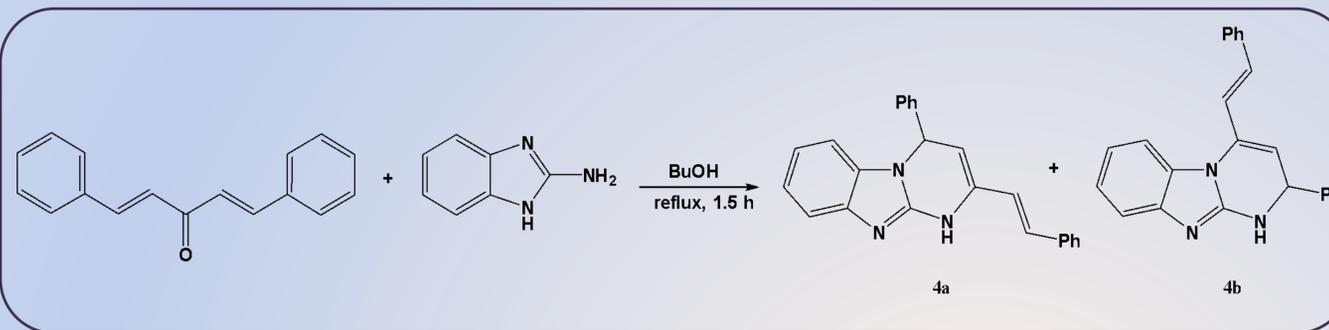
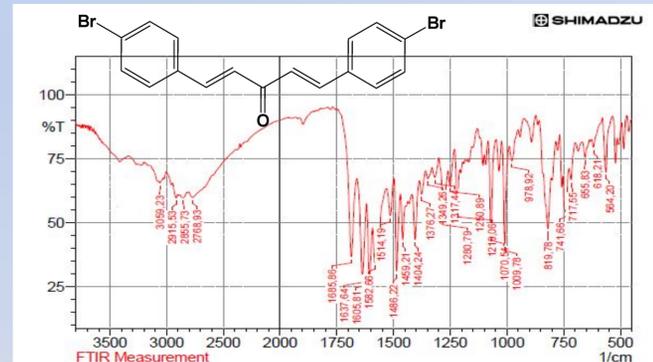
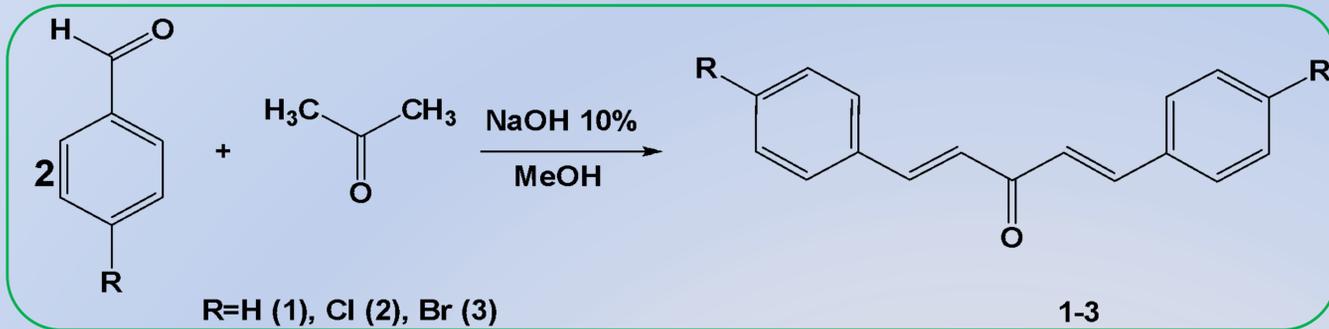
Студенты: Неверов А.В. (2 курс), Шокин А.А. (2 курс)
 Научный руководитель: д.х.н., проф. Сорокин В.В.

Цель:

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

Задачи:

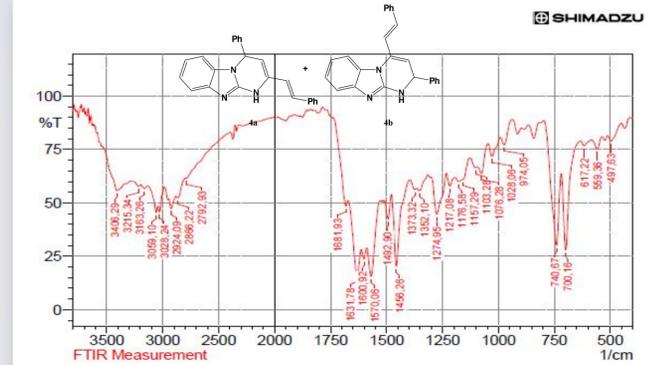
- Получение замещённых дибензилиденацетонов конденсацией ацетона с замещёнными ароматическими альдегидами
- Проведение двухкомпонентной конденсации дибензилиденацетона с 2-аминобензимидазолом
- Установление состава и строения продуктов реакций.



No.	Пик	Интенсивн.	Корр. интенсивн.	База (H)	База (L)	Площадь	Корр. площади
1	354.2	89.855	21.454	575.87	536.23	3.452	1.763
2	619.21	79.447	4.739	626.99	579.93	3.282	0.382
3	659.83	74.48	0.403	669.33	637.5	3.232	0.482
4	717.55	85.083	7.704	725.23	696.26	3.727	0.483
5	741.89	54.999	1.261	742.83	727.19	3.117	0.103
6	819.78	47.612	20.64	840.04	805.32	3.344	2.611
7	978.92	74.143	7.592	989.53	951.91	3.736	0.712
8	1039.78	41.251	39.588	1023.28	990.49	3.262	3.274
9	1070.54	45.491	38.546	1083.08	1048.38	5.834	2.884
10	1219.06	54.995	19.884	1230.84	1209.45	4.157	1.307
11	1280.89	84.458	8.111	1258.81	1231.8	4.123	0.562
12	1280.79	51.577	21.37	1300.08	1259.57	7.04	2.335
13	1317.44	87.719	5.502	1326.98	1301.04	4.443	0.576
14	1349.26	87.185	3.498	1357.94	1339.94	4.375	0.341
15	1376.27	61.087	6.616	1384.95	1358.91	4.874	0.575
16	1404.24	43.478	16.856	1417.74	1385.91	8.282	2.062
17	1459.21	43.348	15.956	1458.86	1443.84	6.148	1.249
18	1486.22	30.81	34.117	1496.83	1469.82	8.838	3.622
19	1514.19	82.783	12.374	1528.65	1497.79	7.043	1.335
20	1562.69	34.438	11.723	1592.31	1567.23	5.995	1.363
21	1605.81	28.177	24.518	1618.35	1593.27	10.283	3.194
22	1637.64	29.058	32.57	1659.82	1619.31	13.928	5.496
23	1666.89	36.76	38.758	1741.8	1699.78	14.119	6.169
24	2788.93	59.938	2.543	2803.65	2866.7	28.816	1.298
25	2829.73	59.72	1.594	2879.85	2820.05	13.991	0.417
26	2917.33	56.075	2.499	2946.39	2904.92	6.745	0.468
27	3096.23	85.511	1.176	3070.81	3031.26	7.062	0.164
28	3274.49	72.653	0.509	3339.07	3283.09	10.334	0.114
29	3406.33	72.906	3.707	3442.42	3338.03	24.185	2.207

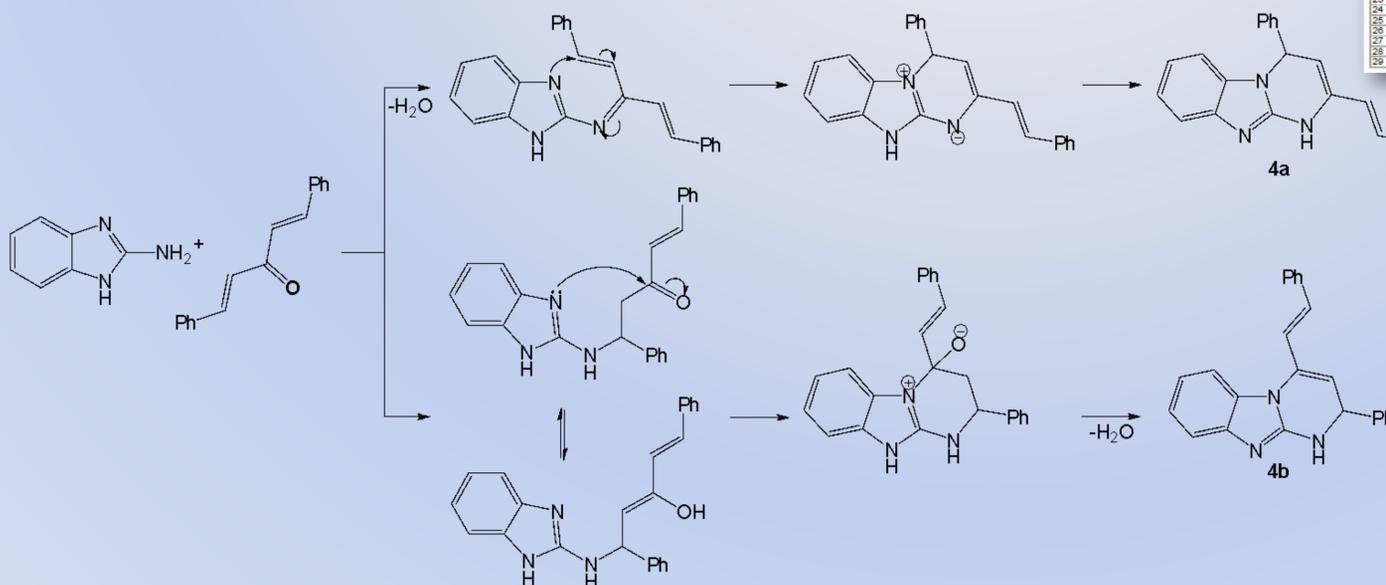
Продукт реакции	Условия перекристаллизации	Т пл., °C	Выход, %
1	Гексан/бензол 50/50	110-112	90
2	Гексан/бензол 50/50	185-187	75
3	Гексан/бензол 50/50	210-211	66
4a-b	Этанол	205-210	63

Продукт реакции	ИК ν, см ⁻¹ (валентные колебания, ν)				
	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	497.83	75.283	3.234	511.14	481.34	5.049	0.58
2	556.36	75.288	4.997	582.5	538.14	4.83	0.598
3	617.22	76.817	2.387	632.65	584.43	5.149	0.288
4	700.16	27.889	39.307	719.45	634.66	20.033	7.709
5	740.67	29.99	39.967	796.6	721.38	20.197	10.585
6	974.05	77.227	6.053	989.48	939.33	4.247	0.718
7	1028.08	71.809	6.375	1045.42	991.41	5.502	1.549
8	1076.28	63.705	6.906	1091.71	1047.35	7.053	0.827
9	1103.28	86.488	1.541	1126.43	1093.84	5.507	0.191
10	1167.29	90.913	9.938	1159.22	1128.38	6.935	0.886
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	44.678	17.909	1300.02	1244.44	13.111	5.094
14	1362.1	55.703	2.827	1383.67	1315.45	11.886	0.402
15	1375.32	55.295	1.534	1394.53	1365.9	6.91	0.194
16	1459.29	20.255	35.935	1477.47	1396.45	29.843	10.289
17	1462.9	42.411	10.882	1508.33	1479.4	6.519	1.417
18	1570.06	15.695	19.829	1687.42	1529.55	31.465	7.723
19	1600.52	23.653	4.263	1612.49	1569.34	13.532	0.961
20	1631.78	16.077	19.109	1670.35	1614.42	31.166	7.343
21	1681.93	48.614	9.271	1737.86	1672.28	11.836	1.098
22	2283.72	61.509	0.108	2794.85	2593.66	54.205	0.047
23	2866.22	52.238	2.451	2881.65	2796.78	21.074	0.704
24	2924.09	47.345	4.953	2945.3	2893.58	18.8	1.244
25	3028.24	45.679	5.057	3041.74	2885.81	16.196	0.815
26	3059.1	45.487	4.938	3134.33	3043.67	25.562	0.816
27	3163.28	156.77	1.452	3194.12	3138.25	13.837	0.347
28	3215.34	57.722	1.238	3267.77	3199.05	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 замещёнными ароматическими альдегидами получены *para*- замещённые 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-а]пиримидина 4a и 2-фенил-4-стирил дигидробензо[4,5]имидазоло[1,2-а]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.