

Памяти профессора М. А. Юровской (1940–2021)

## Синтез несимметрично 2,7-дизамещенных 1,3-дизапириенов, новых перспективных объектов супрамолекулярной химии

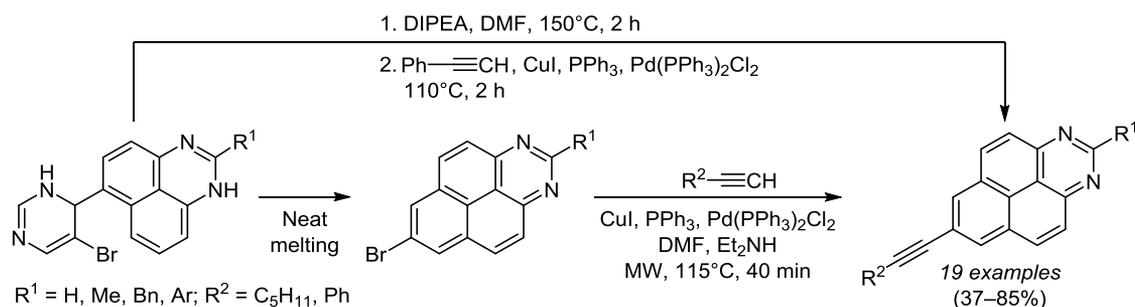
Станислав В. Щербаков<sup>1\*</sup>, Олег Н. Надин<sup>1</sup>, Виктория Ю. Щербакова<sup>1,2</sup>, Сергей Н. Овчаров<sup>1</sup>, Александр В. Аксенов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Северо-Кавказский федеральный университет,  
ул. Пушкина, 1, Ставрополь 355017, Россия; e-mail: sshcherbakov@ncfu.ru

<sup>2</sup> Ставропольский научно-исследовательский противочумный институт Роспотребнадзора,  
ул. Индустриальная, 15, Ставрополь 355029, Россия; e-mail: shcherbakova\_viktoria@mail.ru

Поступило 3.08.2021

Принято 30.08.2021



Синтезирован ряд несимметрично 2,7-дизамещенных 1,3-дизапириенов кросс-сочетанием Соногаширы 2-замещенных 7-бром-бензо[gh]перимидинов с фенил- и пентилацетиленами. Разработана методика прямого одnoreакторного синтеза из 2-замещенных 6-(5-бром-3,4-дигидропиримидин-4-ил)-1H-перимидинов. Предложенный способ функционализации 1,3-дизапириенов может найти применение в супрамолекулярной химии.

**Ключевые слова:** азапириены, 1,3-дизапириены, перимидины, терминальные ацетилены, кросс-сочетание Соногаширы.

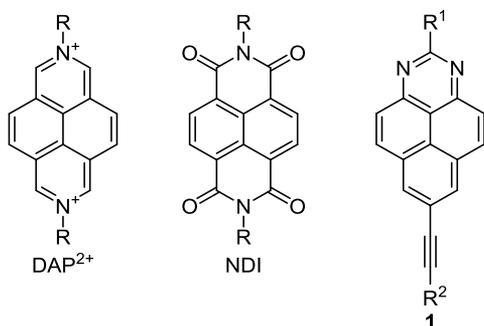
Достижения в химии полиазагетероциклов<sup>1</sup> способствуют широкому использованию азапириенов в супрамолекулярной химии<sup>2</sup> в качестве структурных блоков молекулярных машин, наносенсоров и нанокатализаторов.<sup>3</sup> Применение производных азапириенов рассматривается как перспективный метод получения нанографенов жидкостной эксфолиацией графита.<sup>4</sup> Производные азапириенов могут использоваться для функционализации графенов<sup>5</sup> и углеродных точек,<sup>6</sup> а также для получения новых мезопорных материалов,<sup>7</sup> что способствует дальнейшему изучению свойств и методов получения азапириенов.

Наряду с известной биологической активностью в качестве ДНК-интеркаляторов,<sup>8</sup> азапириены проявляют способность к дестабилизации липосомального слоя<sup>9</sup> и используются при разработке нековалентных ингибиторов ацетилхолинэстеразы,<sup>10</sup> а также допаминовых сенсоров.<sup>11</sup> Гераностические аналоги ванкомицина с 1,8-дизапириеновым фрагментом показали высокую селективную активность против грамположительных

бактерий.<sup>12</sup> Производные ааптамина,<sup>13a</sup> бензо[de][1,6]-нафтиридинового алкалоида, выделенные из морских губок, обладают широким спектром биологической активности, его аналоги на основе 3,8,11-триазапирен-1-она проявляют антиВИЧ-1<sup>13b</sup> и противораковые свойства.<sup>13c</sup>

В супрамолекулярной химии среди азапириенов на настоящий момент наиболее широкое применение нашли производные дикатиона 2,7-дизапириения (DAP<sup>2+</sup>) и нафталиндиимида (NDI) (рис. 1),<sup>2,3</sup> что объясняется простотой получения исходных материалов простым алкилированием,<sup>14</sup> причем производные DAP<sup>2+</sup> в том числе могут быть легко получены из NDI.<sup>15</sup> Тем не менее синтез несимметрично замещенных производных DAP<sup>2+</sup> и NDI в большинстве случаев затруднителен или ограничен некоторыми методами.<sup>8a,11,16</sup>

В данной работе мы предлагаем синтез новых плоских дизамещенных азапириеновых систем **1** (рис. 1), которые могут быть использованы как спейсеры в



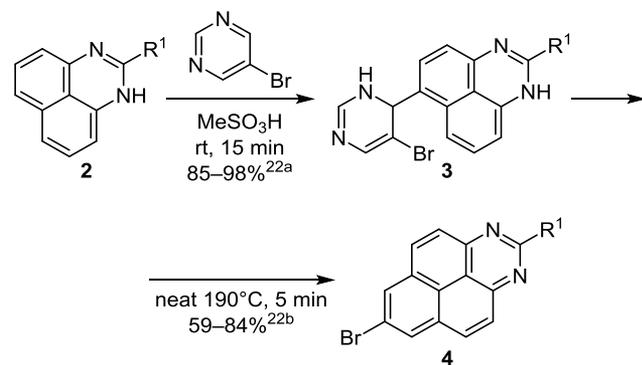
**Рисунок 1.** Структуры замещенных производных DAP<sup>2+</sup>, NDI и дизамещенных азапиренов **1**, используемых в супрамолекулярной химии.

биологических и медицинских приложениях,<sup>8–12</sup> супрамолекулярных взаимодействиях,<sup>2</sup> в молекулярном машиностроении<sup>3</sup> и функционализации наноматериалов.<sup>5–7</sup> Нам пока известен только один пример использования 1,3-дизапиренов в супрамолекулярной системе,<sup>17</sup> вероятно, вследствие малой доступности их 2,7-дизамещенных производных.

Основные способы синтеза азапиренов были достаточно хорошо описаны.<sup>18</sup> Обзор реакций *peri*-аннелирования<sup>19</sup> дает дополнительное представление о методах получения рассматриваемых гетероциклов. В наших лабораториях за текущие годы был также разработан ряд методов синтеза и функционализации азапиренов.<sup>20</sup> За последнее время появилось несколько методов непрямого синтеза дизапиренов, которые могут быть использованы для получения несимметричных 2,7-дизамещенных производных.<sup>21</sup>

В рамках проводимых нами исследований был разработан<sup>22</sup> новый общий подход к синтезу 7-бромбензо[*gh*]перимидинов **4**, основанный на термической циклизации 6-(5-бром-3,4-дигидропиримидин-4-ил)-1*H*-перимидинов **3**,<sup>22b</sup> получаемых реакцией 2-замещенных перимидинов **2** с 5-бромпиримидином при комнатной температуре в MeSO<sub>3</sub>H<sup>22a</sup> (схема 1).

#### Схема 1

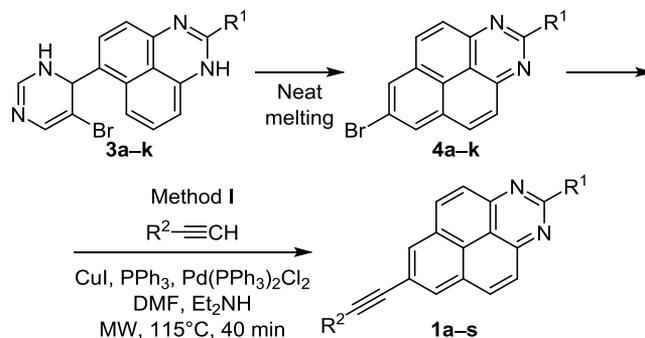


R<sup>1</sup> = H, Me, Ph, 4-EtC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-*i*-PrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, PhCH<sub>2</sub>, 2-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-MeC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 2-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 2-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-MeOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 3,4,5-(MeO)<sub>3</sub>C<sub>6</sub>H<sub>2</sub>, 3-HOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>, 4-Me<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>

Для функционализации 7-бромбензо[*gh*]перимидинов **4a–k** мы использовали реакцию кросс-сочетания Соногаширы,<sup>23</sup> которая ожидаемо привела к ранее

неизвестным 7-(фенилэтинил)бензо[*gh*]перимидинам **1a–j** и 7-(гепт-1-ин-1-ил)бензо[*gh*]перимидинам **1k–s** (схема 2, табл. 1). Реакция осуществлялась в среде ДМФА в условиях микроволнового излучения с контролем температуры. Данное превращение является типичным методом получения гетарилацетиленов.<sup>24</sup>

#### Схема 2

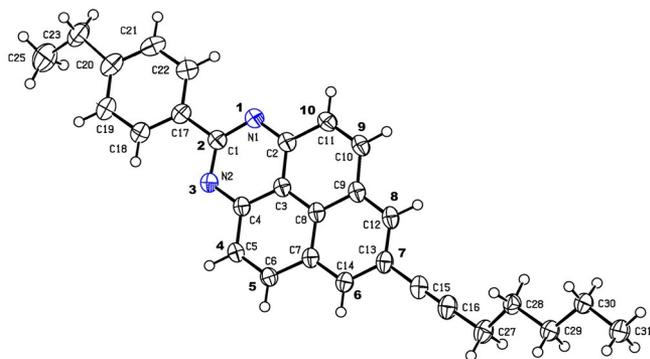
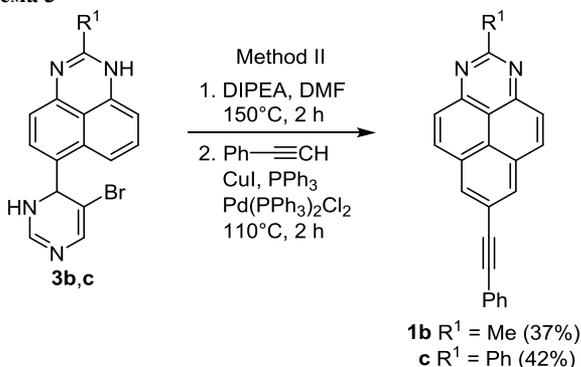


**Таблица 1.** Выходы 1,3-дизапиренов **1a–s**, полученных по методу I

Соединение	R <sup>1</sup>	R <sup>2</sup>	Выход, %
<b>1a</b>	H	Ph	85
<b>1b</b>	Me	Ph	83
<b>1c</b>	Ph	Ph	76
<b>1d</b>	4-EtC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Ph	78
<b>1e</b>	4- <i>i</i> -PrC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Ph	81
<b>1f</b>	PhCH <sub>2</sub>	Ph	80
<b>1g</b>	4-MeC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Ph	77
<b>1h</b>	2-MeC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Ph	79
<b>1i</b>	3-HOC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Ph	80
<b>1j</b>	4-Me <sub>2</sub> NC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	Ph	78
<b>1k</b>	H	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	81
<b>1l</b>	Me	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	75
<b>1m</b>	Ph	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	84
<b>1n</b>	4-EtC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	79
<b>1o</b>	4- <i>i</i> -PrC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	78
<b>1p</b>	4-MeC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	81
<b>1q</b>	2-MeC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	82
<b>1r</b>	3-HOC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	79
<b>1s</b>	2-HOC <sub>6</sub> H <sub>4</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>11</sub>	76

Нами также был разработан альтернативный одно-реакторный протокол синтеза 7-(фенилэтинил)бензо[*gh*]перимидинов **1b,c** (метод II, схема 3). Руководствуясь предположением, что можно пропустить стадию выделения 7-бромбензо[*gh*]перимидинов **4a–k**, соединения **3b,c**, растворенные в ДМФА, кипятили в течение 2 ч, после чего температуру понизили до 110°C и добавляли реагенты для проведения реакции кросс-

Схема 3



**Рисунок 2.** Молекулярная структура соединения **1n** в представлении атомов эллипсоидами тепловых колебаний с 50% вероятностью.

сочетания, при этом шло образование продуктов **1b,c** со средними суммарными выходами (схема 3).

Строение полученных соединений **1a–s** было подтверждено методами спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии высокого разрешения, а также рентгеноструктурным анализом соединения **1n** (рис. 2). Полученные соединения обладают ярко выраженными флуоресцентными свойствами, исследование которых продолжается в настоящий момент.

Таким образом, нами был разработан новый удобный метод получения несимметрично 2,7-дизамещенных бензо[*gh*]перимидинов (1,3-диазапиренов) как с помощью постадийного микроволнового синтеза из 2-замещенных 7-бромбензо[*gh*]перимидинов, так и прямой одnoreакторной процедурой из 2-замещенных 6-(5-бром-3,4-дигидропиридин-4-ил)-1*H*-перимидинов с использованием обычного нагревания. Сравнительное удобство метода позволит широко использовать плоские дизамещенные азапиреновые системы в супрамолекулярной химии, функционализации наноматериалов и в качестве флуоресцентных маркеров.

### Экспериментальная часть

ИК спектры зарегистрированы в тонком слое на FT-IR спектрометре Shimadzu IRAffinity-1S с насадкой PIKE MIRacle SR-ATR (призма ZnSe). Спектры ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C записаны на приборе Bruker Avance III HD (400 и 101 МГц соответственно) с широкополосным криодатчиком Bruker CryoProbe Prodigy VBO в CDCl<sub>3</sub> или DMSO-*d*<sub>6</sub>, внутренние стандарты – остаточные сигналы раство-

рителей:<sup>25</sup> CHCl<sub>3</sub> (7.26 м. д. для ядер <sup>1</sup>H и 77.2 м. д. для ядер <sup>13</sup>C) и DMSO-*d*<sub>5</sub> (2.50 м. д. для ядер <sup>1</sup>H и 39.5 м. д. для ядер <sup>13</sup>C). Обработка спектров ЯМР осуществлена в программе Mestrelab Research MestReNova v.12.0.4. Масс-спектры высокого разрешения (ионизация электро-распылением) записаны на хромато-масс-спектрометре Q-TOF Bruker mAxis Impact в растворах MeCN–H<sub>2</sub>O, калибровка – по внутреннему стандарту HCO<sub>2</sub>Na/HCO<sub>2</sub>H. Реакции, нагреваемые микроволновым излучением, проведены в пробирках размера G10 в микроволновой печи Anton Paar Monowave 300 с магнитной мешалкой и автоматическим контролем температуры. Температуры плавления определены на приборе Stuart SMP30. Контроль за протеканием реакций и чистотой полученных соединений осуществлен методом ТСХ на пластинах Merck TLC Silica gel 60 F<sub>254</sub>, система растворителей EtOAc – петролейный эфир, 1:3, проявление в УФ свете (254 и 365 нм). Колоночная хроматография проведена на силикагеле MP EcoChrom Silica 32–63 μm, 60 Å.

Все коммерческие реагенты использованы без дополнительной очистки, если не указано особо. ДМФА очищен перегонкой при пониженном давлении и пропусканием тока азота в течение 50 мин.

**Получение соединений 1a–s** (общая методика). Метод I. К смеси 1 ммоль соответствующего ацетилена и 1 ммоль 7-бромбензо[*gh*]перимидина<sup>22b</sup> **4a–k** в 5 мл сухого ДМФА добавляют 1.5 мл сухого Et<sub>3</sub>NH,<sup>26a</sup> 22.7 мг (0.087 ммоль) PPh<sub>3</sub>, 14.7 мг (0.021 ммоль) Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, 3.8 мг (0.020 ммоль) CuI и подвергают действию микроволнового излучения с контролем температуры (115°C) при перемешивании в течение 40 мин. После остывания суспензию растворяют в 100 мл EtOAc и промывают насыщенным раствором NH<sub>4</sub>Cl (2 × 25 мл), затем H<sub>2</sub>O (2 × 25 мл). Органическую часть упаривают до объема 5 мл и выпавший при охлаждении осадок отфильтровывают, промывают 5 мл смеси EtOAc – петролейный эфир, 1:3, и сушат на воздухе.

Метод II (получение соединений **1b,c**). Раствор 1 ммоль соответствующего 6-(5-бром-3,4-дигидропиридин-4-ил)-1*H*-перимидина **3b,c**,<sup>22a</sup> в 10 мл сухого ДМФА и 5 мл сухого DIPEA<sup>26b</sup> кипятят в течение 2 ч в колбе с обратным холодильником. Далее в реакционную колбу добавляют 102 мг (1 ммоль) фенилацетилена, 22.7 мг (0.087 ммоль) PPh<sub>3</sub>, 14.7 мг (0.021 ммоль) Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> и 3.8 мг (0.02 ммоль) CuI. Нагревают еще 2 ч при 110°C. После охлаждения смесь растворяют в H<sub>2</sub>O и экстрагируют EtOAc (2 × 50 мл). Органическую часть упаривают, выделенный продукт очищают хроматографически на короткой колонке с силикагелем, элюент EtOAc – петролейный эфир, 1:3, собирают первую окрашенную фракцию, далее растворитель упаривают до объема 5 мл и выпавший при охлаждении осадок отфильтровывают, промывают 5 мл смеси EtOAc – петролейный эфир, 1:3 и сушат на воздухе.

**7-(Фенилэтинил)бензо[*gh*]перимидин (1a).** Выход 259 мг (85%), желтый порошок, т. пл. 192.4–195.3°C. R<sub>f</sub> 0.20 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр, ν, см<sup>-1</sup>: 3056, 1634, 1586, 1409, 1332, 1294, 1242, 886, 755. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H (DMSO-*d*<sub>6</sub>), δ, м. д. (*J*, Гц): 9.77

(1H, с, Н-2 Ar); 8.84 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.78 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-4,10 Ar); 8.26 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-5,9 Ar); 7.74–7.67 (2H, м, Н-2,6 Ph); 7.52–7.51 (3H, м, Н-3–5 Ph). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д.: 156.3; 153.1; 136.1; 131.6; 129.3; 129.2; 128.9; 127.4; 121.9; 121.6; 120.8; 114.9; 90.9; 88.9. Найдено,  $m/z$ : 305.1073 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{22}\text{H}_{12}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 305.1070.

**2-Метил-7-(фенилэтинил)бензо[gh]перимидин (1b).** Выход 264 мг (83%, метод I), 117 мг (37%, метод II), светло-желтый порошок, т. пл. 228–230°C.  $R_f$  0.23 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 3056, 1634, 1586, 1409, 1332, 1294, 1242, 886, 755. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.52 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.46 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-4,10 Ar); 8.15 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-5,9 Ar); 7.69–7.62 (2H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.45–7.38 (3H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 3.16 (с, 3H,  $\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 165.9; 154.2; 135.8; 131.9; 131.7; 129.3; 128.9; 128.7; 127.6; 122.9; 122.4; 121.8; 114.0; 91.2; 89.0; 27.2. Найдено,  $m/z$ : 319.1230 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{23}\text{H}_{15}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 319.1235.

**2-Фенил-7-(фенилэтинил)бензо[gh]перимидин (1c).** Выход 289 мг (76%, метод I), 158 мг (42%, метод II), светло-желтый порошок, т. пл. 240–242°C.  $R_f$  0.90 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 3062, 1964, 1799, 1632, 1585, 1519, 1485, 1400, 1305, 1169, 890, 755. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.83 (2H, д,  $J = 6.7$ , Н-2,6 2-Ph); 8.61–8.44 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.34 (2H, д,  $J = 8.1$ , Н-5,9 Ar); 7.70–7.52 (5H, м, Н-3–5 2-Ph, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.42 (3H, уш. с, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 166.3; 154.2; 139.4; 136.1; 132.0; 131.0; 129.5; 129.3; 129.0; 128.7; 128.1; 122.9; 122.7; 121.9; 114.6; 91.5; 89.0. Найдено,  $m/z$ : 381.1386 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{28}\text{H}_{17}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 381.1383.

**7-(Фенилэтинил)-2-(4-этилфенил)бензо[gh]перимидин (1d).** Выход 317 мг (78%), светло-желтый порошок, т. пл. 229–231°C.  $R_f$  0.93 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 2952, 1940, 1589, 1519, 1400, 1305, 1175, 1017, 884, 846, 748. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.73 (2H, д,  $J = 8.0$ , Н-2,6  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 8.55–8.41 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.29 (2H, д,  $J = 9.0$ , Н-5,9 Ar); 7.71–7.57 (2H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.46–7.36 (5H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph, Н-3,5  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 2.78 (2H, к,  $J = 7.5$ ,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.33 (3H, т,  $J = 7.5$ ,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_2\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.4; 154.4; 147.4; 136.2; 135.8; 132.0; 131.7; 129.5; 129.2; 128.9; 128.7; 128.5; 128.3; 123.0; 122.5; 122.0; 114.6; 91.3; 89.1; 29.1; 15.6. Найдено,  $m/z$ : 409.1699 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{30}\text{H}_{21}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 409.1695.

**2-(4-Изопропилфенил)-7-(фенилэтинил)бензо[gh]перимидин (1e).** Выход 343 мг (81%), серый порошок, т. пл. 266–268°C.  $R_f$  0.93 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 2964, 1584, 1519, 1400, 1303, 1181, 1097, 887, 844, 751. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.73 (2H, д,  $J = 7.8$ , Н-2,6  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ ); 8.44–8.39 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.33 (2H, уш. с, Н-5,9 Ar); 7.65–7.60 (2H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.46–7.40 (5H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph, Н-3,5  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ ); 3.09–2.98 (1H, м,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ ); 1.34 (6H, д,  $J = 7.0$ , 2 $\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$

( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 161.1; 152.3; 146.3; 141.6; 136.2; 132.0; 131.8; 129.4; 129.1; 128.9; 128.5; 127.5; 127.0; 122.7; 122.6; 121.4; 114.0; 91.5; 88.8; 34.2; 23.9. Найдено,  $m/z$ : 423.1856 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{31}\text{H}_{23}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 423.1859.

**2-Бензил-7-(фенилэтинил)бензо[gh]перимидин (1f).** Выход 317 мг (80%), светло-желтый порошок, т. пл. 177–182°C.  $R_f$  0.66 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 2925, 1727, 1589, 1490, 1401, 1271, 1123, 1072, 884, 752. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.65–8.46 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.38–8.23 (2H, м, Н-5,9 Ar); 7.70–7.54 (4H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph, Н-2,6  $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ ); 7.47–7.38 (3H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.32 (2H, т,  $J = 7.6$ , Н-3,5  $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ ); 7.24–7.19 (1H, м, Н-4,  $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ ); 4.78 (2H, с,  $\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 166.0; 153.7; 138.4; 136.9; 132.6; 132.0; 129.6; 129.3; 129.1; 128.7; 127.1; 126.8; 123.2; 122.7; 121.3; 114.0; 91.9; 88.7; 46.0. Найдено,  $m/z$ : 395.1543 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{29}\text{H}_{19}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 395.1545.

**2-(пара-Толил)-7-(фенилэтинил)бензо[gh]перимидин (1g).** Выход 305 мг (77%), светло-желтый порошок, т. пл. 238–240°C.  $R_f$  0.90 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 3062, 1586, 1521, 1490, 1403, 1303, 1172, 1020, 887, 832, 757. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.73 (2H, д,  $J = 8.1$ , Н-2,6  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ ); 8.54 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.50 (2H, д,  $J = 9.1$ , Н-4,10 Ar); 8.31 (2H, д,  $J = 9.1$ , Н-5,9 Ar); 7.67–7.65 (2H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.45–7.38 (5H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph, Н-3,5  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ ); 2.48 (3H, с,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.3; 154.3; 149.9; 141.2; 135.8; 132.0; 131.8; 129.7; 129.5; 129.2; 129.0; 128.7; 128.2; 122.9; 122.5; 122.0; 114.6; 91.3; 89.1; 21.7. Найдено,  $m/z$ : 395.1543 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{29}\text{H}_{19}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 395.1547.

**2-(орто-Толил)-7-(фенилэтинил)бензо[gh]перимидин (1h).** Выход 312 мг (79%), светло-коричневый порошок, т. пл. 219–222°C.  $R_f$  0.87 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 2977, 1585, 1516, 1398, 1305, 1204, 1088, 889, 852, 760. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.67–8.47 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.36 (2H, д,  $J = 9.1$ , Н-5,9 Ar); 8.08–7.93 (1H, м, Н-6  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ ); 7.76–7.58 (2H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.47–7.37 (6H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph, Н-3–5  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ ); 2.66 (3H, с,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.3; 157.4; 153.8; 137.6; 136.5; 132.3; 132.0; 131.5; 131.3; 129.8; 129.6; 129.1; 128.7; 127.7; 126.4; 123.1; 122.8; 121.9; 114.0; 91.8; 88.9; 21.1. Найдено,  $m/z$ : 395.1543 [M+H] $^+$ .  $\text{C}_{29}\text{H}_{19}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 395.1549.

**3-[7-(Фенилэтинил)бензо[gh]перимидин-2-ил]фенол (1i).** Выход 316 мг (80%), светло-желтый порошок, т. пл. 259–261°C.  $R_f$  0.60 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 3286, 1586, 1524, 1486, 1398, 1302, 1211, 996, 879, 837, 755. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 9.70 (1H, с,  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ); 8.82–8.68 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.29–8.18 (4H, м, Н-5,9 Ar, Н-2,4  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ); 7.71–7.65 (2H, м, Н-2,6  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.54–7.46 (3H, м, Н-3–5  $\text{C}\equiv\text{C}$ -Ph); 7.41 (1H, т,  $J = 8.1$ , Н-5  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ); 6.97 (1H, д,  $J = 8.1$ , Н-6  $\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д.: 161.2; 157.9; 153.7; 139.6; 136.2; 131.6; 129.8; 129.3; 129.1; 129.0; 127.8; 122.0; 121.3; 121.1; 119.4; 117.9; 115.2; 113.7; 90.8; 89.1.

Найдено,  $m/z$ : 397.1335  $[M+H]^+$ .  $C_{28}H_{17}N_2O$ . Вычислено,  $m/z$ : 397.1338.

***N,N*-Диметил-4-[7-(фенилэтинил)бензо[*gh*]перимидин-2-ил]анилин (1j).** Выделенный по методу I продукт очищают хроматографически на короткой колонке с силикагелем, элюент  $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3, собирают первую окрашенную фракцию, далее растворитель упаривают до объема 5 мл и выпавший при охлаждении осадок отфильтровывают, промывают 5 мл смеси  $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3 и сушат на воздухе. Выход 332 мг (78%), светло-желтый порошок, т. пл. 235–240°C.  $R_f$  0.87 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2894, 1583, 1516, 1397, 1361, 1182, 1124, 948, 882, 820, 748. Спектр ЯМР  $^1H$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.78 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.72 (2H, д,  $J = 9.3$ , Н-4,10 Ar); 8.61 (2H, д,  $J = 8.8$ , Н-3,5  $C_6H_4N(CH_3)_2$ ); 8.23 (2H, д,  $J = 9.3$ , Н-5,9 Ar); 7.73–7.67 (2H, м, Н-2,6  $C\equiv C-Ph$ ); 7.55–7.46 (3H, м, Н-3–5  $C\equiv C-Ph$ ); 6.90 (2H, д,  $J = 8.8$ , Н-2,6  $C_6H_4N(CH_3)_2$ ); 3.06 (6H, с,  $2CH_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}C$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.1; 153.9; 152.1; 135.9; 131.6; 131.5; 129.8; 129.2; 129.0; 128.9; 127.9; 125.3; 122.0; 121.6; 120.8; 113.2; 111.6; 90.6; 89.2; 39.8. Найдено,  $m/z$ : 424.1808  $[M+H]^+$ .  $C_{30}H_{22}N_3$ . Вычислено,  $m/z$ : 424.1809.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)бензо[*gh*]перимидин (1k).** Выход 242 мг (81%), светло-серый порошок, т. пл. 119–124°C.  $R_f$  0.34 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2937, 2235, 1585, 1516, 1408, 1323, 1293, 892, 849, 724. Спектр ЯМР  $^1H$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 9.76 (1H, с, Н-2 Ar); 8.74 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-4,10 Ar); 8.67 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.24 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-5,9 Ar); 2.57 (2H, т,  $J = 7.0$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.65 (2H, кв,  $J = 7.1$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.43–1.33 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 0.93 (3H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}C$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д.: 156.1; 152.9; 136.0; 131.6; 129.1; 127.2; 122.7; 120.4; 115.0; 92.8; 80.3; 30.6; 27.8; 21.7; 18.7; 13.9. Найдено,  $m/z$ : 299.1543  $[M+H]^+$ .  $C_{21}H_{19}N_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 299.1544.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)-2-метилбензо[*gh*]перимидин (1l).** Выход 236 мг (75%), светло-серый порошок, т. пл. 143–145°C.  $R_f$  0.31 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2935, 2229, 1587, 1518, 1408, 1323, 1293, 890, 848, 727. Спектр ЯМР  $^1H$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.44 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-4,10 Ar); 8.40 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.15 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-5,9 Ar); 3.17 (3H, с,  $2-CH_3$ ); 2.53 (2H, т,  $J = 7.1$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.71 (2H, кв,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.57–1.36 (4H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 0.96 (3H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}C$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 164.4; 153.4; 136.7; 132.6; 129.2; 126.7; 123.9; 121.0; 113.8; 93.3; 80.1; 31.4; 28.5; 26.5; 22.4; 19.7; 14.2. Найдено,  $m/z$ : 313.1699  $[M+H]^+$ .  $C_{22}H_{21}N_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 313.1699.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)-2-фенилбензо[*gh*]перимидин (1m).** Выход 316 мг (84%), бежевый порошок, т. пл. 119–120°C.  $R_f$  0.94 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2937, 2235, 1585, 1516, 1463, 1395, 1308, 886, 847, 694. Спектр ЯМР  $^1H$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.80

(2H, д,  $J = 8.4$ , Н-2,6 2-Ph); 8.43–8.32 (4H, м, Н-4,6,8,10 Ar); 8.28–8.19 (2H, м, Н-5,9 Ar); 7.62–7.54 (3H, м, Н-3–5 2-Ph); 2.53 (2H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.72 (2H, кв,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.58–1.49 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.49–1.37 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 0.98 (3H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}C$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.1; 154.1; 138.9; 135.4; 131.5; 130.5; 129.3; 129.0; 128.7; 128.0; 123.2; 121.4; 114.5; 92.6; 80.3; 31.3; 28.5; 22.3; 19.6; 14.1. Найдено,  $m/z$ : 375.1856  $[M+H]^+$ .  $C_{27}H_{23}N_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 375.1854.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)-2-(4-этилфенил)бензо[*gh*]перимидин (1n).** Выход 319 мг (79%), желтый порошок, т. пл. 156.7–157.5°C.  $R_f$  0.88 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2925, 2238, 1585, 1519, 1456, 1400, 1309, 1176, 1135, 1019, 884, 840, 676. Спектр ЯМР  $^1H$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.71 (2H, д,  $J = 8.0$ , Н-2,6  $C_6H_4CH_2CH_3$ ); 8.39 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-4,10 Ar); 8.33 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.22 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-5,9 Ar); 7.42 (2H, д,  $J = 8.0$ , Н-3,5  $C_6H_4CH_2CH_3$ ); 2.78 (2H, к,  $J = 7.7$ ,  $C_6H_4CH_2CH_3$ ); 2.53 (2H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.76–1.66 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.57–1.48 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.50–1.36 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.33 (3H, т,  $J = 7.7$ ,  $C_6H_4CH_2CH_3$ ); 0.98 (3H, т,  $J = 7.3$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}C$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.4; 154.3; 147.1; 136.6; 135.4; 131.6; 129.4; 129.1; 128.4; 128.1; 123.2; 121.6; 114.5; 92.6; 80.5; 31.4; 29.0; 28.6; 22.4; 19.7; 15.7; 14.2. Найдено,  $m/z$ : 403.2169  $[M+H]^+$ .  $C_{29}H_{27}N_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 403.2163.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)-2-(4-изопропилфенил)бензо[*gh*]перимидин (1o).** Выход 323 мг (78%), темно-зеленый порошок, т. пл. 154°C.  $R_f$  0.94 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2958, 2232, 1586, 1516, 1456, 1397, 1312, 1179, 1136, 1020, 881, 844, 677. Спектр ЯМР  $^1H$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.72 (2H, д,  $J = 8.0$ , Н-2,6  $C_6H_4CH(CH_3)_2$ ); 8.41 (2H, д,  $J = 9.1$ , Н-4,10 Ar); 8.35 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.26 (2H, д,  $J = 9.2$ , Н-5,9 Ar); 7.46 (2H, д,  $J = 8.0$ , Н-3,5  $C_6H_4CH(CH_3)_2$ ); 3.04 (1H, спт,  $J = 7.0$ ,  $C_6H_4CH(CH_3)_2$ ); 2.53 (2H, т,  $J = 7.1$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.72 (2H, кв,  $J = 7.3$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.58–1.48 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.48–1.39 (2H, м,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ); 1.35 (6H, д,  $J = 7.0$ ,  $C_6H_4CH(CH_3)_2$ ); 0.98 (3H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv CCH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}C$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.3; 154.2; 151.8; 136.6; 135.5; 131.7; 129.4; 129.2; 128.1; 127.0; 123.3; 121.6; 114.5; 92.7; 80.4; 34.3; 31.4; 28.6; 24.1; 22.4; 19.7; 14.2. Найдено,  $m/z$ : 417.2325  $[M+H]^+$ .  $C_{30}H_{29}N_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 417.2320.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)-2-(пара-толил)бензо[*gh*]перимидин (1p).** Выход 316 мг (81%), темно-желтый порошок, т. пл. 179–181°C.  $R_f$  0.90 ( $EtOAc$  – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 2950, 2238, 1589, 1519, 1458, 1401, 1309, 1176, 1138, 1023, 882, 835, 673. Спектр ЯМР  $^1H$  ( $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.73 (2H, д,  $J = 7.9$ , Н-2,6  $C_6H_4CH_3$ ); 8.45 (2H, д,  $J = 9.1$ , Н-4,10 Ar); 8.39 (2H, с, Н-6,8 Ar); 8.29 (2H, д,  $J = 9.1$ , Н-5,9 Ar); 7.42 (2H, д,  $J = 7.9$ , Н-3,5,  $C_6H_4CH_3$ ); 2.56 (2H, т,  $J = 7.3$ ,

$C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 2.50 (3H, с,  $C_6H_4\text{CH}_3$ ); 1.75 (2H, кв,  $J = 7.3$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.59–1.52 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.50–1.41 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.00 (3H, т,  $J = 7.3$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 162.0; 154.1; 140.8; 135.9; 135.5; 131.6; 129.5; 129.3; 128.9; 127.9; 123.2; 121.5; 114.4; 92.6; 80.3; 31.3; 28.5; 22.3; 21.6; 19.6; 14.1. Найдено,  $m/z$ : 389.2012  $[\text{M}+\text{H}]^+$ .  $\text{C}_{28}\text{H}_{25}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 389.2010.

**7-(Гепт-1-ин-1-ил)-2-(орто-голил)бензо[gh]перимидин (1q)**. Выход 320 мг (82%), серый порошок, т. пл. 175–176°C.  $R_f$  0.97 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 2922, 2480, 2235, 1588, 1517, 1464, 1397, 1308, 1182, 882, 719, 674. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.51–8.39 (4H, м, H-4,6,8,10 Ar); 8.28 (2H, м, H-5,9 Ar); 8.04–7.93 (1H, м, H-6  $C_6H_4\text{CH}_3$ ); 7.40 (3H, м, H-3–5  $C_6H_4\text{CH}_3$ ); 2.65 (с, 3H,  $C_6H_4\text{CH}_3$ ); 2.55 (2H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.73 (2H, кв,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.57–1.50 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.43 (2H, секстет,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 0.98 (3H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 164.6; 153.6; 139.0; 137.3; 136.1; 132.0; 131.3; 131.1; 129.4 (2C); 127.6; 126.2; 123.7; 121.1; 113.8; 93.0; 80.2; 31.2; 28.4; 22.3; 20.9; 19.6; 14.1. Найдено,  $m/z$ : 389.2012  $[\text{M}+\text{H}]^+$ .  $\text{C}_{28}\text{H}_{25}\text{N}_2$ . Вычислено,  $m/z$ : 389.2011.

**3-[7-(Гепт-1-ин-1-ил)бензо[gh]перимидин-2-ил]фенол (1r)**. Выход 310 мг (79%), бледно-желтый порошок, т. пл. 180–181°C.  $R_f$  0.84 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 3130, 2928, 1586, 1516, 1461, 1438, 1397, 1299, 1219, 1002, 882, 846, 696. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 9.69 (1H, с,  $C_6H_4\text{OH}$ ); 8.71 (2H, д,  $J = 9.3$ , H-4,10 Ar); 8.60 (2H, с, H-6,8 Ar); 8.28–8.20 (4H, м, H-5,9 Ar, H-2,4  $C_6H_4\text{OH}$ ); 7.41 (1H, т,  $J = 7.8$ , H-5  $C_6H_4\text{OH}$ ); 7.01–6.94 (1H, м, H-6  $C_6H_4\text{OH}$ ); 2.54 (2H, т,  $J = 7.1$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.64 (2H, кв,  $J = 7.1$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.53–1.43 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.43–1.32 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 0.92 (3H, т,  $J = 7.1$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (ДМСО- $d_6$ ),  $\delta$ , м. д.: 161.1; 157.8; 153.6; 139.7; 136.2; 131.6; 129.8; 129.1; 127.6; 122.4; 120.7; 119.4; 117.9; 115.2; 113.8; 92.7; 80.3; 30.6; 27.9; 21.7; 18.8; 13.9. Найдено,  $m/z$ : 391.1805  $[\text{M}+\text{H}]^+$ .  $\text{C}_{27}\text{H}_{23}\text{N}_2\text{O}$ . Вычислено,  $m/z$ : 391.1803.

**2-(7-(Гепт-1-ин-1-ил)бензо[gh]перимидин-2-ил)фенол (1s)**. Выход 295 мг (76%), желтый порошок, т. пл. 188–188°C.  $R_f$  0.94 (EtOAc – петролейный эфир, 1:3). ИК спектр,  $\nu$ ,  $\text{cm}^{-1}$ : 2934, 2245, 1591, 1478, 1423, 1390, 1310, 1247, 1136, 1032, 889, 850, 753, 673. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д. ( $J$ , Гц): 8.97 (1H, д,  $J = 7.7$ , H-3  $C_6H_4\text{OH}$ ); 8.52 (2H, д,  $J = 9.1$ , H-4,10 Ar); 8.42–8.34 (4H, м, H-5,6,8,9 Ar); 7.44 (1H, т,  $J = 7.7$ , H-4  $C_6H_4\text{OH}$ ); 7.07 (2H, м, H-5,6  $C_6H_4\text{OH}$ ); 2.53 (2H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.72 (2H, кв,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.57–1.48 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 1.48–1.38 (2H, м,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ); 0.98 (3H, т,  $J = 7.2$ ,  $C\equiv C\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  ( $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 161.2; 159.5; 151.6; 139.2; 134.8; 134.43; 130.4;

129.0; 125.4; 125.1; 120.3; 120.0; 118.6; 116.8; 113.4; 94.6; 79.7; 31.4; 28.5; 22.4; 19.7; 14.2. Найдено,  $m/z$ : 391.1805  $[\text{M}+\text{H}]^+$ .  $\text{C}_{27}\text{H}_{23}\text{N}_2\text{O}$ . Вычислено,  $m/z$ : 391.1805.

**Рентгеноструктурный анализ соединения 1n** проведен на дифрактометре Agilent SuperNova с использованием микрофокусного источника рентгеновского излучения с анодом из меди и координатным CCD-детектором Atlas S2. Кристаллы, пригодные для PCA, выращены путем медленного испарения раствора соединения **1n** в  $\text{CHCl}_3$  при комнатной температуре. Сбор отражений, определение и уточнение параметров элементарной ячейки проведены с использованием специализированного программного пакета CrysAlisPro.<sup>27</sup> Структура расшифрована с помощью программы ShelXT<sup>28</sup> и уточнена с помощью программы ShelXL,<sup>29</sup> молекулярная графика и подготовка материала для публикации выполнены с использованием программного пакета Olex2.<sup>30</sup> Полный набор данных PCA соединения **1n** депонирован в Кембриджском банке структурных данных (депонент CCDC 2032528).

Файл сопроводительных материалов, содержащий спектры ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  соединений **1a–s**, а также данные PCA соединения **1n**, доступен на сайте журнала <http://hgs.osi.lv>.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ (грант МК-2298.2021.1.3).*

### Список литературы

1. Stępień, M.; Gońka, E.; Żyła, M.; Sprutta, N. *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 3479.
2. (a) *Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials*; Steed, J. W.; Gale, P. A., Eds.; John Wiley & Sons: Hoboken, 2012. (b) Barin, G.; Coskun, A.; Fouda, M. M. G.; Stoddart, J. F. *ChemPlusChem* **2012**, *77*, 159.
3. (a) Erbas-Cakmak, S.; Leigh, D. A.; McTernan, C. T.; Nussbaumer, A. L. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 10081. (b) *The Nature of the Mechanical Bond: From Molecules to Machines*; Bruns, C. J.; Stoddart, J. F.; John Wiley & Sons: Hoboken, 2017.
4. (a) Schlierf, A.; Samori, P.; Palermo, V. *J. Mater. Chem. C* **2014**, *2*, 3129. (b) Sampath, S.; Basuray, A. N.; Hartlieb, K. J.; Ayun, T.; Stupp, S. I.; Stoddart, J. F. *Adv. Mater.* **2013**, *25*, 2740. (c) Narayan, R.; Kim, S. O. *Nano Convergence* **2015**, *2*, 20.
5. (a) Georgakilas, V.; Otyepka, M.; Bourlino, A. B.; Chandra, V.; Kim, N.; Kemp, K. C.; Hobza, P.; Zboril, R.; Kim, K. S. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 6156. (b) *Functionalization of Graphene*; Georgakilas, V., Ed.; Wiley-VCH: Weinheim, 2014.
6. (a) Zhang, J.; Yu, S.-H. *Mater. Today* **2016**, *19*, 382. (b) Mishra, V.; Patil, A.; Thakur, S.; Kesharwani, P. *Drug Discovery Today* **2018**, *23*, 1219.
7. (a) Teyssandier, J.; Battaglini, N.; Seydou, M.; Anquetin, G.; Diawara, B.; Sun, X.; Maurel, F.; Lang, P. *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 8737. (b) Balkus, K. J., Jr.; Pisklak, T. J.; Hundt, G.; Sibert, J.; Zhang, Y. *Microporous Mesoporous Mater.* **2008**, *112*, 1.
8. (a) Terenzi, A.; Ducani, C.; Blanco, V.; Zerzankova, L.; Westendorf, A. F.; Peinador, C.; Quintela, J. M.; Bednarski, P. J.; Barone, G.; Hannon, M. J. *Chem.–Eur. J.* **2012**, *18*, 10983. (b) Shen, W.; Deng, H.; Gao, Z. *Anti-Cancer Agents Med.*

- Chem.* **2013**, 13, 632. (c) Zhiron, A. M.; Kovalev, D. A.; Ulshina, D. V.; Pisarenko, S. V.; Demidov, O. P.; Borovlev, I. V. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2020**, 56, 674. [Химия гетероцикл. соединений **2020**, 56, 674.]
9. Zappacosta, R.; Semeraro, M.; Baroncini, M.; Silvi, S.; Aschi, M.; Credi, A.; Fontana, A. *Small* **2010**, 6, 952.
  10. Tumiatti, V.; Milelli, A.; Minarini, A.; Rosini, M.; Bolognesi, M. L.; Micco, M.; Andrisano, V.; Bartolini, M.; Mancini, F.; Recanatini, M.; Cavalli, A. *J. Med. Chem.* **2008**, 51, 7308.
  11. (a) Raymo, F. M.; Cejas, M. A. *Org. Lett.* **2002**, 4, 3183. (b) Cejas, M. A.; Raymo, F. M. *Langmuir* **2005**, 21, 5795.
  12. Ariyasu, S.; Too, P. C.; Mu, J.; Goh, C. C.; Ding, Y.; Tnay, Y. L.; Yeow, E. K. L.; Yang, L.; Ng, L. G.; Chiba, S.; Xing, B. *Chem. Commun.* **2016**, 52, 4667.
  13. (a) Larghi, E. L.; Bohn, M. L.; Kaufman, T. S. *Tetrahedron* **2009**, 65, 4257. (b) Pham, C.-D.; Hartmann, R.; Müller, W. E. G.; de Voogd, N.; Lai, D.; Proksch, P. *J. Nat. Prod.* **2013**, 76, 103. (c) Yu, H.-B.; Yang, F.; Sun, F.; Li, J.; Jiao, W.-H.; Gan, J.-H.; Hu, W.-Z.; Lin, H.-W. *Mar. Drugs* **2014**, 12, 6003.
  14. Fang, L.; Wang, C.; Fahrenbach, A. C.; Trabolsi, A.; Botros, Y. Y.; Stoddart, J. F. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2011**, 50, 1805.
  15. Sotiriou-Leventis, C.; Mao, Z. *J. Heterocycl. Chem.* **2000**, 37, 1665.
  16. Peinador, C.; Blanco, V.; Quintela, J. M. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 920.
  17. Takahashi, Y.; Takehisa, M.; Tanaka, E.; Harada, J.; Kumai, R.; Inabe, T. *J. Phys. Chem. Lett.* **2020**, 11, 1336.
  18. (a) Borovlev, I. V.; Demidov, O. P. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2003**, 39, 1417. [Химия гетероцикл. соединений **2003**, 1612.] (b) Borovlev, I. V.; Demidov, O. P. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2008**, 44, 1311. [Химия гетероцикл. соединений **2008**, 1613.]
  19. (a) Aksenov, A. V.; Aksenova, I. V. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2009**, 45, 130. [Химия гетероцикл. соединений **2009**, 167.] (b) Aksenov, A. V.; Aksenov, N. A.; Nadein, O. N.; Smushkevich, Yu. I. *Rev. J. Chem.* **2011**, 1, 359. [Обзор журн. химии **2011**, 1, 350.] (c) Aksenov, A. V.; Lyakhovnenko, A. S.; Aksenov, N. A.; Aksenova, I. V. *Rev. J. Chem.* **2012**, 2, 208. [Обзор журн. химии **2012**, 2, 228.] (d) Yelmame, G. B.; Jagtap, S. B. *Mater. Sci. Res. India* **2021**, 18, 14.
  20. (a) Aksenova, I. V.; Aksenov, A. V.; Lyakhovnenko, A. S. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2008**, 44, 765. [Химия гетероцикл. соединений **2008**, 947.] (b) Aksenov, A. V.; Aksenova, I. V.; Lyakhovnenko, A. S.; Aksenov, N. A. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2008**, 44, 1379. [Химия гетероцикл. соединений **2008**, 1694.] (c) Aksenov, A. V.; Borovlev, I. V.; Aksenova, I. V.; Pisarenko, S. V.; Kovalev, D. A. *Tetrahedron Lett.* **2008**, 49, 707. (d) Aksenov, A. V.; Lyakhovnenko, A. S.; Aksenova, I. V.; Nadein, O. N. *Tetrahedron Lett.* **2008**, 49, 1808. (e) Aksenov, A. V.; Aksenova, I. V.; Lyakhovnenko, A. S. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2009**, 45, 119. [Химия гетероцикл. соединений **2009**, 139.] (f) Aksenov, A. V.; Aksenov, I. V.; Lyakhovnenko, A. S.; Lobach, D. A. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **2009**, 58, 859. [Изв. АН, Сер. хим. **2009**, 841.] (g) Aksenov, A. V.; Aksenov, N. A.; Lyakhovnenko, A. S.; Aksenova, I. V. *Synthesis* **2009**, 3439. (h) Aksenov, A. V.; Lyakhovnenko, A. S.; Karaivanov, N. Ts.; Aksenova, I. V. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2010**, 46, 1146. [Химия гетероцикл. соединений **2010**, 1418.] (i) Aksenov, A. V.; Aksenov, N. A.; Lyakhovnenko, A. S.; Kumshaeva, A. B.; Aksenova, I. V. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2012**, 48, 634. [Химия гетероцикл. соединений **2012**, 680.] (j) Aksenov, A. V.; Aksenov, N. A.; Lyakhovnenko, A. S.; Smirnov, A. N.; Levina, I. I.; Aksenova, I. V. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2013**, 49, 980. [Химия гетероцикл. соединений **2013**, 1052.] (k) Zhiron, A. M.; Kolesnikova, A. S.; Aksenova, I. V.; Lyakhovnenko, A. S.; Aksenov, A. V. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **2013**, 62, 1125. [Изв. АН, Сер. хим. **2013**, 1125.] (l) Aksenov, A. V.; Ovcharov, D. S.; Aksenov, N. A.; Aksenov, D. A.; Nadein, O. N.; Rubin, M. *RSC Adv.* **2017**, 7, 29927.
  21. (a) Verbitskiy, E. V.; Dinastiya, E. M.; Eltsov, O. S.; Zhilina, E. F.; Schepochkin, A. V.; Rusinov, G. L.; Chupakhin, O. N.; Charushin, V. N. *Mendeleev Commun.* **2020**, 30, 142. (b) Molenda, R.; Boldt, S.; Villinger, A.; Ehlers, P.; Langer, P. *J. Org. Chem.* **2020**, 85, 12823. (c) Ge, Q.; Hu, Y.; Li, B.; Wang, B. *Org. Lett.* **2016**, 18, 2483. (d) Feng, B.; Wan, D.; Yan, L.; Kadam, V. D.; You, J.; Gao, G. *RSC Adv.* **2016**, 6, 66407.
  22. (a) Aksenov, A. V.; Shcherbakov, S. V.; Lobach, I. V.; Aksenova, I. V.; Rubin, M. *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, 12, 1666. (b) Aksenov, A. V.; Shcherbakov, S. V.; Lobach, I. V.; Voskressensky, L. G.; Rubin, M. *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 30, 4121.
  23. (a) Kanwal, I.; Mujahid, A.; Rasool, N.; Rizwan, K.; Malik, A.; Ahmad, G.; Shah, S. A. A.; Rashid, U.; Nasir, N. M. *Catalysts* **2020**, 10, 443. (b) Karak, M.; Barbosa, L. C. A.; Hargaden, G. C. *RSC Adv.* **2014**, 4, 53442. (c) Alonso, D. A.; Baeza, A.; Chinchilla, R.; Gómez, C.; Guillena, G.; Pastor, I. M.; Ramón, D. J. *Catalysts* **2018**, 8, 202. (d) Hong, K.; Sajjadi, M.; Suh, J. M.; Zhang, K.; Nasrollahzadeh, M.; Jang, H. W.; Varma, R. S.; Shokouhimehr, M. *ACS Appl. Nano Mater.* **2020**, 3, 2070. (e) Nair, P. P.; Philip, R. M.; Anilkumar, G. *Org. Biomol. Chem.* **2021**, 19, 4228. (f) Bakherad, M. *Appl. Organomet. Chem.* **2013**, 27, 125.
  24. Kopchuk, D. S.; Taniya, O. S.; Khasanov, A. F.; Krinochkin, A. P.; Kovalev, I. S.; Pospelova, T. A.; Zyryanov, G. V.; Rusinov, V. L.; Chupakhin, O. N. *Chem. Heterocycl. Compd.* **2019**, 55, 490. [Химия гетероцикл. соединений **2019**, 55, 490.]
  25. Gottlieb, H. E.; Kotlyar, V.; Nudelman, A. *J. Org. Chem.* **1997**, 62, 7512.
  26. (a) Armarego, W. L. F. *Purification of Laboratory Chemicals*; Butterworth-Heinemann Elsevier: Oxford, 2017, 8th ed., p. 137. (b) Armarego, W. L. F. *Purification of Laboratory Chemicals*; Butterworth-Heinemann Elsevier: Oxford, 2017, 8th ed., p. 142.
  27. *CrysAlisPro*, v.1.171.38.41; Rigaku Oxford Diffraction, 2015. <https://www.rigaku.com/en/products/smc/crystalis>.
  28. Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Adv.* **2015**, 471, 3.
  29. Sheldrick, G. M. *Acta Crystallogr., Sect. C: Struct. Chem.* **2015**, C71, 3.
  30. Dolomanov, O. V.; Bourhis, L. J.; Gildea, R. J.; Howard, J. A. K.; Puschmann, H. *J. Appl. Crystallogr.* **2009**, 42, 339.