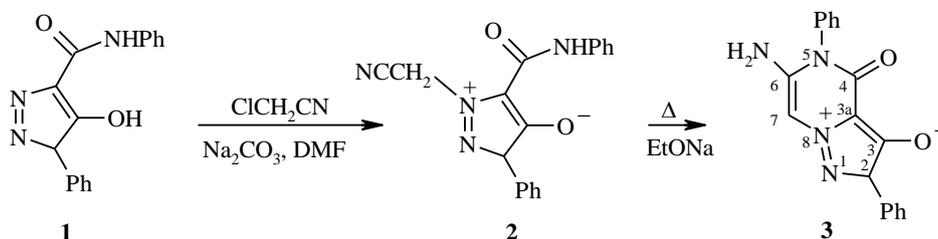


СИНТЕЗ [1,2,3]ТРИАЗОЛО[1,5-*a*]ПИРАЗИНИЙ-3-ОЛАТА

Ключевые слова: 1,2,3-триазоло[1,5-*a*]пиразиний-3-олаты, триазолы, реакции алкилирования, цвиттер-ион.

Ранее нами было показано [1], что алкилирование натриевых солей 1-арил- и 1-арилметиленамино-1,2,3-триазол-5-олатов алкилгалогенидами приводит к цвиттер-ионной структуре 3-алкил-1,2,3-триазол-3-илий-5-олату. Мы предлагаем использовать данную реакцию для синтеза новых цвиттер-ионных конденсированных гетероциклических систем.

Мы нашли, что реакция 1-фенил-1,2,3-триазол-4-*N*-фенилкарбоксамид (1) с хлорацетонитрилом приводит к аналогичному продукту алкилирования 2, при кипячении которого в этилате натрия образуется [1,2,3]триазоло[1,5-*a*]пиразиний-3-олат 3. В спектре ЯМР ^{13}C соединения 3 наблюдали КССВ $^3J_{\text{H6-C3a}} = 3.2$ Гц, в то время как сигнал C_3 регистрировался как синглет.



3-Фенил-5-фенилкарбамоил-1-цианометил-3Н-1,2,3-триазолиний-4-олат (2). К суспензии 0.28 г (1 ммоль) триазола 1 и 0.11 г (1 ммоль) Na_2CO_3 в 1 мл ДМФА добавляют 0.20 мл (3 ммоль) хлорацетонитрила и нагревают 3 ч при 100 °С. После охлаждения до комнатной температуры соединение 2 осаждают 50 мл воды, отфильтровывают и кристаллизуют из спирта. Выход 0.21 г (66%). Т. пл. 144 °С. Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 319 [M]⁺ (55), 227 (16), 187 (11), 116 (5), 105 (15), 92 (5), 77 (100). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м. д., J (Гц): 10.22 (1H, с, NH); 8.00 (2H, д, $J = 7.3$, ArH); 7.50–7.77 (5H, м, ArH); 7.35 (2H, д, д, $J = 7.6$, $J = 8.2$, ArH); 7.11 (1H, д, д, $J = 7.5$, $J = 8.1$, ArH); 6.11 (2H, с, CH_2). Найдено, %: N 22.30. $\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_2$. Вычислено, %: N 21.94.

6-Амино-2,5-дифенил-4-оксо-4,5-дигидро-2Н-1,2,3-триазоло[1,5-*a*]пиразиний-3-олат (3). Раствор 0.20 г (0.6 ммоль) соединения 2 и этилата натрия, приготовленного из 0.014 г (0.6 ммоль) Na в 25 мл абсолютного спирта, кипятят 5 ч, охлаждают, выпавший осадок отфильтровывают и кристаллизуют из спирта. Выход 0.16 г (80%). Т. пл. 280 °С. Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 319 [M]⁺ (39), 278 (5), 227 (15), 187 (11), 130 (14), 119 (10), 116 (6), 105 (5), 93 (27), 92 (8), 91 (8), 77 (100). Спектр ЯМР ^1H , (ДМСО- d_6), δ , м. д., J (Гц): 8.29 (1H, с, NH); 8.03 (2H, д, $J = 7.9$, ArH); 7.36–7.50 (4H, м, ArH); 7.40 (1H, уш. с, NH); 7.15–7.22 (3H, м, ArH); 6.98 (1H, с, $\text{C}_{(7)\text{H}}$); 6.82 (1H, д, д, $J = 7.2$, $J = 7.3$, ArH). Спектр ЯМР ^{13}C , (ДМСО- d_6), δ , м. д., J (Гц): 164.32 (с, $\text{C}_{(4)}$); 153.77 (с, $\text{C}_{(3)}$); 152.72 (д, $J = 3.4$, $\text{C}_{(6)}$); 141.87 (д, д, $J = 8.0$, $J = 9.3$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 136.53 (д, д, $J = 9.4$, $J = 8.8$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 128.84 (д, д, $J = 157.3$, $J = 8.2$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 128.50 (д, д, $J = 158.4$, $J = 7.4$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 125.48 (д, д, д, $J = 162.7$, $J = 7.6$, $J = 7.3$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 120.23 (д, д, д, $J = 159.8$, $J = 7.3$, $J = 7.9$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 119.16 (д, м, $J = 165.0$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 118.77 (д, м, $J = 161.8$, $\text{C}_{(\text{Ph})}$); 106.72 (д, $J = 3.2$, $\text{C}_{(3a)}$); 85.41 (д, $J = 189.4$, $\text{C}_{(7)}$). Найдено, %: N 21.59. $\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_2$. Вычислено, %: N 21.94.

Работа выполнена при финансовой поддержке CRDF (проект RC1-2393-ЕК-02) и РФФИ (грант 02-03-96421 Урал).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yu. A. Rozin, E. A. Savel'eva, Yu. Yu. Morzherin, W. Dehaen, S. Toppet, L. Van Meervelt, V. A. Bakulev, *J. Chem. Soc., Perkin Trans 1*, 211 (2002).

**Ю. И. Нейн, Ю. Ю. Моржерин, Ю. А. Розин,
В. А. Бакулев**

Уральский государственный технический
университет,
Екатеринбург 620002, Россия
e-mail: morzherin@htf.ustu.ru

Поступило в редакцию 29.05.2002

ХГС. – 2002. – № 9. – С. 1302
