

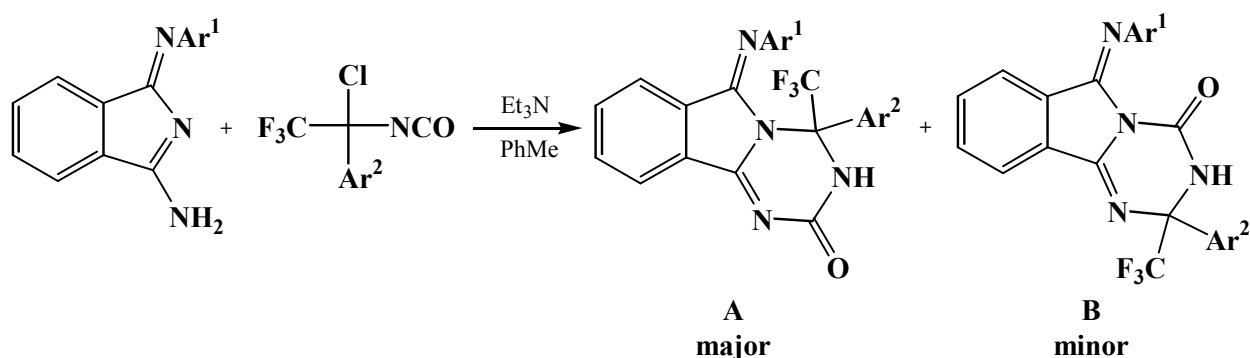
ВЗАЄМОДІЯ ПОХІДНИХ 3-АМІНО-1-ІМІНО-1H-ІЗОІНДОЛУ З 1-ХЛОРОАЛКІЗОЦІАНАТАМИ

Бійцева А.В.¹, Сукач В.А.²

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка
gel@univ.kiev.ua

² Інститут органічної хімії НАН України

Досліджено взаємодію 3-аміно-1-ариліміно-1H-ізоіндолів з такими біфункціональними електрофільними системами, як 1-хлоротрифлуорометиларилізоціанати. З огляду на будову досліджуваних сполук найбільш ймовірним є утворення двох ізомерних продуктів реакції:



Дійсно, при одночасному змішуванні реагентів продуктом реакції є суміш двох сполук, яким в спектрі ЯМР на ядрах ^{19}F відповідають сигнали в області 74 м.ч. (ізомер А) та 80 м.ч. (ізомер В) та. Віднесення сигналів зроблено на основі літературних даних спектрів ЯМР ^{19}F структурно близьких сполук [1].

Знайдено, що на співвідношення ізомерних продуктів реакції впливають:

- 1) Порядок додавання реагентів – поступове додавання ізоціанату до аміну призводить до збільшення кількості ізомеру А.
- 2) Наявність замісника в *o*-положенні залишку Ar^1 – за наявності замісника в *o*-положенні залишку Ar^1 при поступовому додаванні ізоціанату продуктом реакції є лише ізомер А.
- 3) Характер замісника в залишку Ar^2 – за наявності електрондонорного замісника ($-\text{Me}$, $-\text{OMe}$) в залишку в Ar^2 при поступовому додаванні ізоціанату відбувається утворення виключно ізомеру А.
- 4) Температура – при зниженні температури проведення реакції спостерігається збільшення кількості ізомеру В.

Також підібрано умови розділення суміші ізомерних сполук за допомогою колонкової хроматографії.

Будова синтезованих сполук доведена за допомогою спектроскопії ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{19}F та рентгеноструктурного дослідження на прикладі сполуки А ($\text{Ar}^1 = 4\text{-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, $\text{Ar}^2 = 4\text{-OCH}_3\text{C}_6\text{H}_4$).

Таким чином, в результаті наведених вище перетворень було синтезовано ряд нових сполук – похідних дигідротриазино[2,1-*a*]ізоіндолу. Досліджено їх будову в розчині та кристалічному стані. Проведено вдаль розділення сумішей структурних ізомерів та досліджено вплив різних факторів на утворення того чи іншого ізомеру.



1. Вовк М.В., Бальон Я.Г., Крайнова І.Г., Самарай Л.І. Будова продуктів циклоконденсації 1-хлоралкілізоціанатів з 2-амінопіридином і 2-аміногіазолом. Укр. хім. журн., 1995. Т. 61, №7, с. 63-68.