

# НЕОЖИДАННАЯ РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТЬ АЛКИЛИРОВАНИЯ 7-ЗАМЕЩЕННЫХ ([1,2,4]ТРИАЗОЛО[4,3-*a*][1,3,5]ТРИАЗИН-5-ИЛ)ДИНИТРОМЕТАНИДОВ

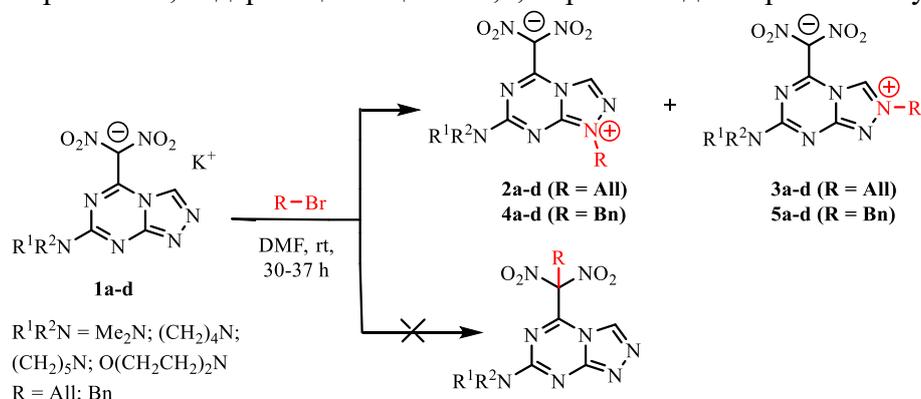
О.В. Головина, В.В. Бахарев

Самарский государственный технический университет,  
инженерно-технологический факультет, Россия, Самара.

E-mail: Golowina.ov@yandex.ru

Химия конденсированных азоло[1,3,5]триазинов активно развивается в последние годы. Динитрометил-1,2,4-триазоло-1,3,5-триазины представляют интерес в качестве базовой структуры для синтеза биологически активных соединений, энергонасыщенных материалов, газогенераторов и молекулярных переключателей. Наличие нескольких неравноценных нуклеофильных центров в динитрометильных производных 1,2,4-триазоло-1,3,5-триазинов открывает широкие возможности для синтеза разнообразных производных в реакциях с электрофильными агентами.

В настоящей работе приведены результаты исследований реакции алкилирования 1,2,4-триазоло-1,3,5-триазинов, содержащих в цикле 1,3,5-триазина динитрометильную группу.



Взаимодействие калиевых солей 7-диалкиламино-([1,2,4]триазоло[4,3-*a*][1,3,5]триазин-5-ил)динитрометанидов (**1a-d**) с аллил- и бензилбромидом в ДМФА вместо ожидаемого *S*-алкилирования по динитрометильной группе протекает по двум реакционным центрам N1 и N2 цикла 1,2,4-триазола с образованием цвиттер-ионных [1,2,4]триазоло[4,3-*a*][1,3,5]триазин-1(2)-ий-5-ил]динитрометанидов. Во всех экспериментах были получены смеси двух изомеров (**2a-d**) и (**3a-d**) (с аллилбромидом) и (**4a-d**) и (**5a-d**) (с бензилбромидом) с преобладанием продуктов алкилирования по положению N1. Разделение смеси изомеров проводили методом препаративной колоночной хроматографии. Полученные экспериментальные результаты хорошо согласуются с данными проведенных квантово-химических расчетов.

Строение полученных соединений (**2-5a-d**) было подтверждено данными ИК,  $^1H$  и  $^{13}C$  ЯМР спектров и РСА. Отнесение сигналов атомов углерода бициклической системы сделано на основе данных  $^1H$ - $^{13}C$  НМВС эксперимента и сопоставления с данными работы [1].

## Библиографический список

1. Особенности реакции Михаэля в ряду ([1,2,4]триазоло[4,3-*a*][1,3,5]триазин-5-ил)динитрометанидов/ О.В. Головина, В.Е. Парфенов, П.А. Слепухин, Д.В. Хакимов, А.Б. Шереметев, В.В. Бахарев // Химия гетероциклических соединений. – 2022. – №58(10). – С. 506-513.