

**ВЗАЄМОДІЯ 2-АЗАГЕТЕРИЛАЦЕТОНІТРИЛІВ ІЗ 1-ХЛОРОБЕНЗИЛІЗОЦІАНАТАМИ**

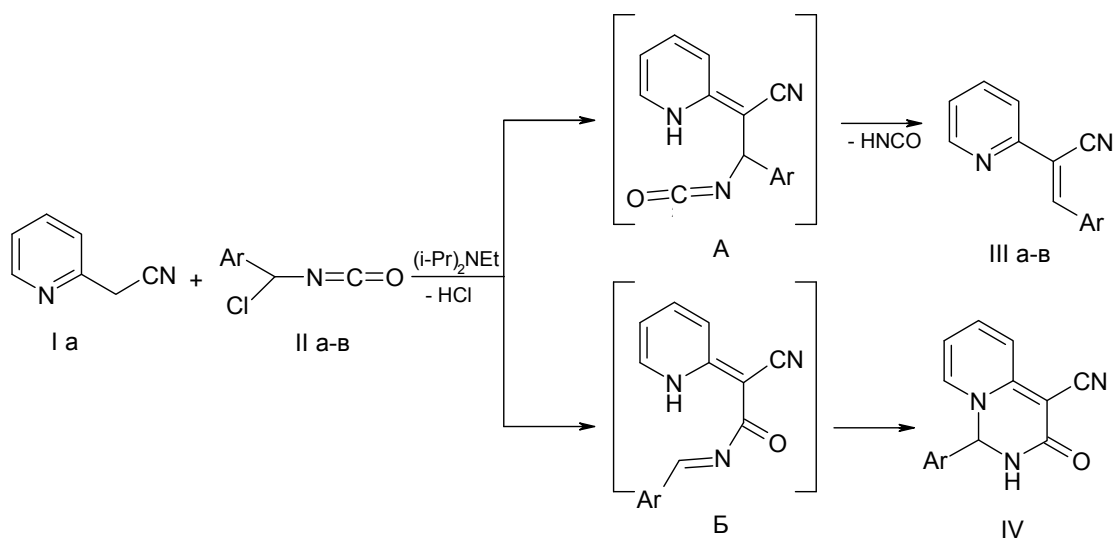
Виявлено вплив гетероциклічного замісника в нітрилах 2-азагетерилоцтових кислот на перебіг їх взаємодії із 1-хлоробензилізоціанатами. Встановлено, що у випадку 2-піридиніл- та 2-бензотіазоліл-ацетонітрилів утворюються 2-(2-піридил, 2-бензотіазоліл)-3-арилакрилонітрили. Циклоконденсація за участю 2-(3-метилбензімідазоліл)ацетонітрилу приводить до тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-1-онів.

**Ключові слова:** 2-азагетерилацетонітрили, 1-хлоробензилізоціанати, 2-(2-азагетерил)-3-арилакрилонітрили, тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-1-они

Похідні 2-азагетерилоцтових кислот є важливими нуклеофільними компонентами в дизайні різноманітних конденсованих азольних та азинових систем [1]. Їх спорідненість із гетероциклічними структурами енамінного типу була використана для отримання низки поліфункціональних конденсованих піримідинів, що було продемонстровано на прикладі взаємодії нітрилів 2-піридил- [2], 2-бензотіазоліл- [3] та 2-бензімідазоліл- [4] ацетонітрилів із 1-арил-2,2,2-трифторо-1-хлоретилізоціанатами та 1,1-дихлоро-2,2,2-тригалогеноетилізоціанатами. Враховуючи істотний вплив структури 1-хлоралкілізоціанатів на регіохімію їх циклізації з дезактивованими енаминами [5-8], видавалось доцільним дослідити реакцію 2-азагетерилацетонітрилів (Ia-в) із 1-хлоробензилізоціанатами (IIa-д) і у випадку її селективного перебігу здійснити спрямований синтез нових конденсованих похідних піримідину, придатних для подальшого біологічного скринінгу.

Встановлено, що взаємодія 2-піридинілацетонітрилу (Ia) з 1-хлоробензилізоціанатами (IIa-в) в киплячому толуолі в присутності діізопропілетиламіну, як акцептора хлороводню, протікає неселективно з утворенням суміші продуктів, з якої були виділені 2-піридинілакрилонітрили (IIIa-в) з виходами 28-33%, а у випадку ізоціанату (IIa) також нітрил 1Н-піридо[1,2-с]піримідинкарбонової кислоти (IV) з виходом 25%.

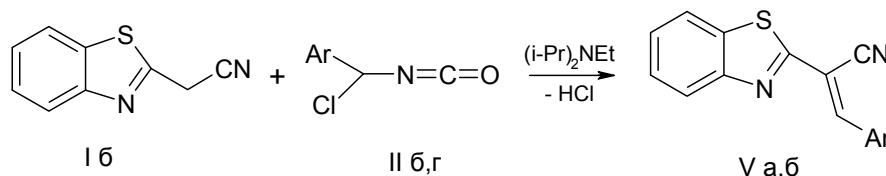
Найвірогідніше, що сполуки типу (III) є результатом первинного С-ізоціанатоалкілювання нітрилу і утворення інтермедіатів А, які не схильні до замикання циклу і в реакційних умовах легко ілімінують ізоціанову кислоту. Натомість, піридопіримідин (IV) є продуктом внутрішньо-молекулярної циклізації інтермедіату Б, який, в свою чергу, утворюється внаслідок первинного С-карбамоїлювання нітрилу.



II, III, Ar = 3-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (a), 4-NO<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (б), 3,4-Cl<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (в); IV, Ar = 3-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>.

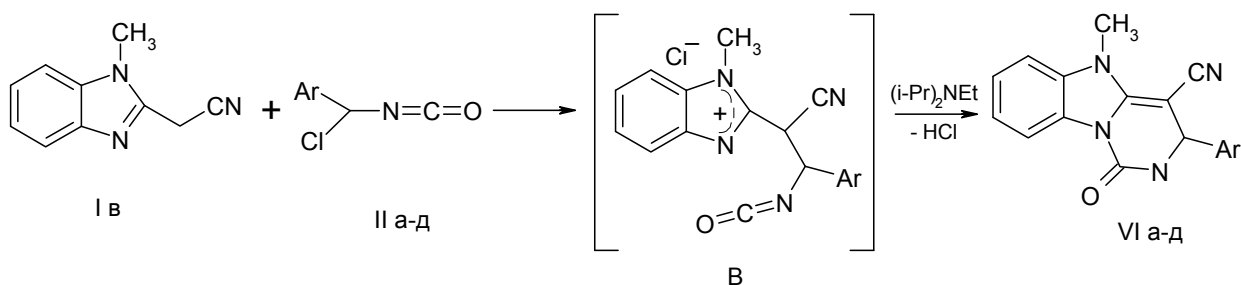
Будова 2-піридинілакрілонітрилів (III-в), серед яких сполука (IIIб) була отримана раніше [9] конденсацією нітрилу (Iа) з 4-нітробензальдегідом, узгоджується з даними спектрів ЯМР  $^1\text{H}$ , в яких поряд із сигналами (гетеро)ароматичних протонів містяться синглети алкенільних протонів в діапазоні 8.45-8.57 м.ч. Наявність в спектрі ЯМР  $^1\text{H}$  сполуки (IV) дублету  $\text{H}^1$  протона при 6.81 м.ч. із КССВ 1.6 Гц, а в спектрі ЯМР  $^{13}\text{C}$  сигналу атома  $\text{C}^1$  при 71.12 м.ч. є строгим доказом її будови і виключає альтернативну структуру 1-оксо-3-арилпіrido[1,2-с]піримідину.

Близьким за хімічною поведінкою до 2-піридоацетонітрилу (Iа) є 2-бензотіазолілацетонітрил (Iб), реакція якого з ізоціанатами (IIб,г) в наведених вище умовах приводить до описаних раніше [10] 2-(2-бензотіазоліл)акрілонітрилів (Va,в) з виходами 53-58%.



II, Ar = Ph (г); V, Ar = 4- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$  (а), Ph (б).

Підвищення основності бензімідазольного циклу у порівнянні з піридиновим та бензотіазольним суттєво позначається на характері взаємодії 2-(3-метилбензімідазоліл)ацетонітрилу (Iв) із 1-хлорбензилізоціанатами (IIа-д), що підтверджується виділенням тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-1-онів (VIа-д) – аналогів продуктів конденсації за участю 1-арил-2,2,2-трифторо-1-хлороетилізоціанатів [4]. Разом з тим на відміну від останніх реакція, очевидно перебігає не через стадію N-карбамоїлювання, а як C-ізоціанатоалкілювання з утворенням бензімідазолієвих інтермедіатів В, дегідрохлорування яких приводить до цільових сполук (VIа-д).



II, Ar=3- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$  (д); VI, Ar=3- $\text{BrC}_6\text{H}_4$  (а), 4- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$  (б), 3,4- $\text{Cl}_2\text{C}_6\text{H}_3$  (в), Ph (г), 3- $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$  (д)

ІЧ спектри синтезованих сполук (VIа-д) характеризуються смугами поглинання груп N-H ( $3280\text{-}3295\text{ cm}^{-1}$ ),  $\text{C}\equiv\text{N}$  ( $2205\text{-}2210\text{ cm}^{-1}$ ) та  $\text{C}=\text{O}$  ( $1660\text{-}1670\text{ cm}^{-1}$ ). В спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  фіксуються дублети протонів  $\text{H}^3$  в інтервалі 5.3-5.6 м.ч. із КССВ 1.8-2.2 Гц та N-H протонів в інтервалі 8.6-8.8 м.ч. із такою ж КССВ. Найбільш доказовим аргументом утворення 2,3-дигідропіримідин-1-онового циклу є наявність в спектрах ЯМР  $^{13}\text{C}$  сигналів атомів  $\text{C}^3$  при 53-55 м.ч. та атомів  $\text{C}^1$  при 147-150 м.ч.

### Експериментальна частина

ІЧ спектри сполук у KBr записані на приладі UR-20. Спектри ЯМР  $^1\text{H}$  та  $^{13}\text{C}$  в  $\text{DMSO-d}_6$  виміряні на приладі Bruker Avance DRX-500 (500.13, 125.75 МГц відповідно), внутрішній стандарт – TMS. Хроматомас-спектри одержані на приладі PE SCXAPI 150 EX, детектори UV (250 нм) та ELSOJ.

3-Арил-2-(2-піридиніл)акрілонітрили (III а-в), 2,3-дигідро-1H-піrido[1,2-с]піримідин-4-карбонітрил (IV), 3-арил-2-(2-бензотіазоліл)акрілонітрили (Va,б), 3-арил-1-оксо-2,3-дигідро-1H-піrido[1,2-с]піримідин-4-карбонітрили (VIа-д). До розчину 20 ммоль 2-азагетерілацетонітрилу (Iа-в) в 25 мл сухого толуолу додавали 20 ммоль 1-хлорбензилізоціанату (IIа-д) та 20 ммоль діізопропілетиламіну в 5 мл сухого толуолу і кип'ятили впродовж 1,5 год. Реакційну суміш охолоджували, розчинник відганяли, залишок кристалізували.

**3-(3-Бромобеніл)-2-(2-піридиніл)акрилонітрил (III а).** Вихід 37 %, т.топл. 129-130°C (етанол). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 2235 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 1600 ( $\text{C}=\text{C}$ ). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 7.49-8.04 м ( $6\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.23 с ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.47 с ( $1\text{H}$ ,  $=\text{CH}$ ), 8.77 д ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ). Знайдено, %: С 59.21; Н 3.06; N 9.91.  $\text{M}^+$  286.0.  $\text{C}_{14}\text{H}_9\text{BrN}_2$ . Вираховано, %: С 58.97; Н 3.18; N 9.82. М.285.1.

**3-(4-Нітробеніл)-2-(2-піридиніл)акрилонітрил (III б).** Вихід 33 %, т.топл. 143-144°C (етанол) ([ ] т.топл. 142-143°C).

**3-(3,4-Дихлоробеніл)-2-(2-піридиніл)акрилонітрил (III в).** Вихід 28 %, т.топл. 125-126°C (етанол). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 2230 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 1605 ( $\text{C}=\text{C}$ ). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 7.48-7.96 м ( $5\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.23 с ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.45 с ( $1\text{H}$ ,  $=\text{CH}$ ), 8.69 д ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ). Знайдено, %: С 61.31; Н 2.80; N 10.31.  $\text{M}^+$  276.0.  $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{Cl}_2\text{N}_2$ . Вираховано, %: С 61.12; Н 2.93; N 10.18. М.275.1.

**1-(3-Бромобеніл)-3-оксо-2,3-дигідро-1Н-піридо[1,2-с]піримідин-4-карбонітрил (IV).** Вихід 25 %, т.топл. 289-291°C (етанол). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1690 ( $\text{C}=\text{O}$ ), 2160 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 3240 (N-H). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 6.81 д ( $1\text{H}$ ,  $\text{H}^1$ , J 1.6 Гц), 6.83-7.41 м ( $5\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 7.59 д ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 7.69 т ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.22 д ( $1\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.37 д ( $1\text{H}$ , NH, J 1.6 Гц). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 68.14 ( $\text{C}^4$ ), 71.12 ( $\text{C}^1$ ), 112.53 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 118.19, 118.67, 122.11, 124.51, 128.77, 131.09, 131.79, 137.79, 139.55, 141.10 ( $\text{C}_{\text{аром.}}$ ), 151.44 ( $\text{C}^{4a}$ ), 163.39 ( $\text{C}=\text{O}$ ). Знайдено, %: С 55.01; Н 2.89; N 13.01.  $\text{M}^+$  329.0.  $\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{BrN}_3\text{O}$ . Вираховано, %: С 54.90; Н 3.07; N 12.80. М.328.1.

**2-(2-Бензотіазоліл)-3-(4-нітробеніл)акрилонітрил (V а).** Вихід 58 %, т.топл. 219-221°C (етанол) ([10 ] т.топл. 218-222°C).

**2-(2-Бензотіазоліл)-3-фенілакрилонітрил (V б).** Вихід 53 %, т.топл. 139-141°C (етанол) ([10] т.топл. 138-140°C).

**3-(3-Бромобеніл)-5-метил-1-оксо-1,2,3,5-тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-4-карбонітрил (VI а).** Вихід 47 %, т.топл. 243-245°C (ацетонітрил-ДМФА, 6:1). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1660 ( $\text{C}=\text{O}$ ), 2205 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 3285 (N-H). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 3.63 с ( $3\text{H}$ ,  $\text{CH}_3$ ), 5.31 д ( $1\text{H}$ ,  $\text{H}^3$ , J 2.0 Гц), 7.09-7.42 м ( $7\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 7.82 д ( $2\text{H}_{\text{аром.}}$ , J 7.6 Гц), 8.62 с ( $1\text{H}$ , NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 30.28 ( $\text{CH}_3$ ), 50.46 ( $\text{C}^4$ ), 54.72 ( $\text{C}^3$ ), 112.24 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 113.58, 119.83, 121.38, 122.68, 122.94, 124.26, 125.45, 128.92, 130.38, 133.14, 135.08, 145.42 ( $\text{C}_{\text{аром.}}$ ), 147.64 ( $\text{C}^1$ ), 148.03 ( $\text{C}^5$ ). Знайдено, %: С 56.51; Н 3.40; N 14.91.  $\text{M}^+$  382.0.  $\text{C}_{18}\text{H}_{13}\text{BrN}_4\text{O}$ . Вираховано, %: С 56.71; Н 3.44; N 14.70. М.381.2.

**3-(4-Нітробеніл)-5-метил-1-оксо-1,2,3,5-тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-4-карбонітрил (VI б).** Вихід 43 %, т.топл. 245-246°C (етанол-ДМФА, 2:1). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1665 ( $\text{C}=\text{O}$ ), 2205 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 3285 (N-H). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 3.64 с ( $3\text{H}$ ,  $\text{CH}_3$ ), 5.53 д ( $1\text{H}$ ,  $\text{H}^3$ , J 2.1 Гц), 7.31-7.52 м ( $4\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 7.82 д ( $2\text{H}_{\text{аром.}}$ , J 7.6 Гц), 8.25 д ( $2\text{H}_{\text{аром.}}$ , J 7.6 Гц), 8.77 с ( $1\text{H}$ , NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 30.42 ( $\text{CH}_3$ ), 50.24 ( $\text{C}^4$ ), 54.32 ( $\text{C}^3$ ), 112.24 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 119.52, 121.66, 122.38, 122.64, 123.56, 127.87, 130.58, 133.24, 135.71, 145.21 ( $\text{C}_{\text{аром.}}$ ), 147.68 ( $\text{C}^1$ ), 148.49 ( $\text{C}^5$ ). Знайдено, %: С 62.31; Н 3.80; N 20.21.  $\text{M}^+$  348.0.  $\text{C}_{18}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_3$ . Вираховано, %: С 62.24; Н 3.77; N 20.16. М.347.3.

**3-(3,4-Дихлоробеніл)-5-метил-1-оксо-1,2,3,5-тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-4-карбонітрил (VI в).** Вихід 46 %, т.топл. 234-236°C (етанол-ДМФА, 5:1). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1670 ( $\text{C}=\text{O}$ ), 2210 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 3290 (N-H). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 3.63 с ( $3\text{H}$ ,  $\text{CH}_3$ ), 5.41 д ( $1\text{H}$ ,  $\text{H}^3$ , J 2.0 Гц), 7.16-7.64 м ( $7\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.65 с ( $1\text{H}$ , NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 30.68 ( $\text{CH}_3$ ), 50.16 ( $\text{C}^4$ ), 54.52 ( $\text{C}^3$ ), , 113.18 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 119.03, 122.38, 122.88, 123.84, 124.56, 128.71, 129.60, 131.58, 133.34, 134.07, 135.18, 145.62 ( $\text{C}_{\text{аром.}}$ ), 147.33 ( $\text{C}^1$ ), 148.73 ( $\text{C}^5$ ). Знайдено, %: С 58.34; Н 3.10; N 15.23.  $\text{M}^+$  372.0.  $\text{C}_{18}\text{H}_{12}\text{Cl}_2\text{N}_4\text{O}$ . Вираховано, %: С 58.24; Н 3.26; N 15.09. М.371.2.

**5-Метил-3-феніл-1-оксо-1,2,3,5-тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-4-карбонітрил (VI г).** Вихід 40 %, т.топл. 248-249°C (етанол). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1665 ( $\text{C}=\text{O}$ ), 2210 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 3295 (N-H). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 3.63 с ( $3\text{H}$ ,  $\text{CH}_3$ ), 5.30 д ( $1\text{H}$ ,  $\text{H}^3$ , J 1.8 Гц), 7.09-7.85 м ( $8\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 7.83 д ( $2\text{H}_{\text{аром.}}$ , J 8.2 Гц), 8.67 д ( $1\text{H}$ , NH, J 1.8 Гц). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 29.33 ( $\text{CH}_3$ ), 51.52 ( $\text{C}^4$ ), 55.11 ( $\text{C}^3$ ), 113.32 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 121.92, 123.83, 125.34, 126.15, 128.04, 129.01, 130.81, 131.68, 136.52, 143.06 ( $\text{C}_{\text{аром.}}$ ), 147.40 ( $\text{C}^1$ ), 150.16 ( $\text{C}^5$ ). Знайдено, %: С 71.31; Н 4.80; N 18.27.  $\text{M}^+$  303.0.  $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}$ . Вираховано, %: С 71.51; Н 4.67; N 18.53. М.302.3.

**5-метил-3-(3-нітрофеніл)-1-оксо-1,2,3,5-тетрагідропіримідо[1,6-а]бензімідазол-4-карбонітрил (VI д).** Вихід 42 %, т.топл. 219-221°C (етанол). ІЧ-спектр,  $\nu$ ,  $\text{см}^{-1}$ : 1670 ( $\text{C}=\text{O}$ ), 2210 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 3280 (N-H). Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 3.65 с ( $3\text{H}$ ,  $\text{CH}_3$ ), 5.61 д ( $1\text{H}$ ,  $\text{H}^3$ , J 2.2 Гц), 7.12-8.30 м ( $8\text{H}_{\text{аром.}}$ ), 8.76 ( $1\text{H}$ , NH, J 2.2 Гц). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta$ , м.ч.: 30.01 ( $\text{CH}_3$ ), 50.26 ( $\text{C}^4$ ), 54.35 ( $\text{C}^3$ ), 113.38 ( $\text{C}\equiv\text{N}$ ), 119.53, 121.18, 122.08, 122.97, 123.25, 123.95, 128.02, 129.56, 130.33, 131.55, 134.03, 145.12 ( $\text{C}_{\text{аром.}}$ ), 147.74 ( $\text{C}^1$ ), 147.89 ( $\text{C}^5$ ). Знайдено, %: С 62.44; Н 3.65; N 20.01.  $\text{M}^+$  348.0.  $\text{C}_{18}\text{H}_{13}\text{N}_5\text{O}_3$ . Вираховано, %: С 62.24; Н 3.77; N 20.16. М.347.3.

## Висновки

2-Піридиніл- та 2-бензотіазолилацетонітрили реагують з 1-хлоробензилізоціанатами за схемою фрагментації проміжних продуктів С-ізоціанатоалкілювання і утворення 2-азагетерил-3-арилакрілонітрилів. Використання в аналогічній реакції 2-(3-метилбензімідазоліл)ацетонітрилу приводить до тетрагідропіримідо[1,6-а]безімідазол-1-онів.

## Список літератури

1. Лебедь П.С., Вовк М.В. Конденсовані гетероциклічні сполуки на основі похідних азагетерилоцтових кислот // Журн. орг. фарм. хімії.- 2006.- Т.4, вип. 2(14).- С. 3-23.
2. Вовк М.В., Лебедь П.С., Чернега А.Н. и др. Гетероциклизации функционализированных гетерокумуленов с С,N- и С,О-бинуклеофилами. I. Циклоконденсация 1-хлоралкил-гетерокумуленов и N-(1-хлороалкилиден)уретанов с 2-цианометилпиридином // Химия гетероцикл. соед. – 2004. - №1. – С. 52-63.
3. Вовк М.В., Лебедь П.С., Сукач В.А., Корнилов М.Ю. Гетероциклизации функционализированных гетерокумуленов с С,N- и С,О-бинуклеофилами. II. Взаимодействие 1-хлор-, 1,1-дихлоралкилизотиоцианатов и N-(1-хлоралкилиден)уретанов с 2-бензотіазолилацетонітрилом, 2-бензотіазолилацетатами и ди(2-бензотіазолил)метаном // Журн. орг. химии. – 2003. – Т.39, вып.12. – С. 1852-1859.
4. Вовк М.В., Лебедь П.С., Пироженко В.В., Цимбал И.Ф. Гетероциклизации функционализированных гетерокумуленов с С,N- и С,О-бинуклеофилами. IV. Реакции 1-хлоралкилгетерокумуленов и N-(1-хлоралкилиден)карбаматов с 2-бензімідазолилацетонітрилами и метил-2-бензімідазолилацетатами // Журн. орг. химии. – 2004. – Т.40, вып.11. – С. 1715-1724.
5. Вовк М.В., Пироженко В.В. Взаимодействие 1-хлор-1-арил-2,2,2-трифторэтилизотиоцианатов с этиловым эфиром β-N-метиламинокротоновой кислоты. Синтезы 2-арил-2-трифторометил-1,2,3,4-тетрагидропиримидин-4-онов // Химия гетероцикл. соед. – 1994. - №1. – С. 424-428.
6. Vovk M.V., Sukach V.A., Bol'but A.V., Sinitsa A.D. A convenient synthesis of N1-substituted 3,4-dihydropyridin-2(1H)-ones by cyclocondensation of α-chlorobenzyl isocyanates with ethyl N-alkyl(aryl)-β-aminocrotonates // Synlett. – 2006. - № 3. – P. 375-378.
7. Кушнир О.В., Сукач В.А., Вовк М.В. Гетероциклизации функционализированных гетерокумуленов с С,N-, С,О- и С,S-бинуклеофилами. X. 1-Хлоралкилизотиоцианаты в синтезе новых 5-арилдигидропиримидинов // Журн. орг. химии. – 2009. – Т.45, вып.5. – С. 768-774.
8. Вовк М.В., Кушнир О.В., Сукач В.А., Цымбал И.Ф. Гетероциклизации функционализированных гетерокумуленов с С,N-, С,О- и С,S-бинуклеофилами. XI. Синтез диалкил 2-оксо-3,6-диарил-1,2,3,6-тетрагидропиримидин-4,5-дикарбоксилатов циклоконденсацией 1-хлоробензилізоціанатов с диалкил анилинофумаратами // Журн. орг. химии. – 2010. – Т.46, вып.5. – С. 716-722.
9. Kato T., Shiraishi T., Atsumi T. Synthesis of methylpyridine derivatives. XXV. Synthesis of α-substituted 2-pyridineacetone nitroles // Yakugaku Zasshi. – 1969. – Vol. 89, №2. – P. 188-193. Chem. Abstr. – 1969. – Vol. 70. – 106399z.
10. Sakamoto M., Nozaka A., Shimamoto M. et al. Diels-Alder reaction of benzyliden(cyano)methyl-1,3-benzoxa/thiazoles as stable 1-azabuta-1,3-dienes // J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1. – 1995. - №13. – P. 1759-1770.

## Summary

**Kushnir O.V., Lebed' P.S., Vovk M.V.**

## **INTERACTION OF 2-AZAHETARYLACETONITRILES WITH 1-CHLOROBENZYLISOCYANATES**

An influence of the heterocyclic substitute in nitriles of 2-azaheteroacetic acids on their reactions with 1-chlorobenzylisocyanates has been identified. It was found that 2-pyridinile- and 2-benzotiazolilacetonitriles promote formation of 2-(2-pyridile, 2-benzotiazolile)-3-arylacrylonitriles. A cyclocondensation with 2-(3-methylbenzimidazolile)acetonitrile results in formation of tetrahydropyrimido[1,6-a]benzimidazol-1-ones.