

# СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ ЭТИЛ-4-АРИЛ-2-ОКСО-2,3,4,10-ТЕТРАГИДРОБЕНЗО[4,5]ИМИДАЗО[1,2-*a*]-ПИРИМИДИН-3-КАРБОКСИЛАТОВ

© 2024 г. К. В. Подчерзцева<sup>1</sup>, Т. М. Замараева<sup>1,\*</sup>, Н. В. Слепова<sup>1</sup>, М. В. Дмитриев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Пермская государственная фармацевтическая академия  
Министерства здравоохранения Российской Федерации, Пермь, 614990 Россия

<sup>2</sup> Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, 614990 Россия  
\*e-mail: tanyargfa@yandex.ru

Поступило в редакцию 31 июля 2024 г.

После доработки 16 сентября 2024 г.

Принято к печати 20 сентября 2024 г.

Этил-4-арил-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилаты получены трехкомпонентной конденсацией диэтилмалоната, ароматического альдегида, 2-аминобензимидазола в этаноле в присутствии пиперидина. Структура полученных соединений установлена методами ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C спектроскопии и рентгеноструктурного анализа.

**Ключевые слова:** диэтиловый эфир малоновой кислоты, арилальдегиды, 2-аминобензимидазол, пиперидин, трехкомпонентная реакция

**DOI:** 10.31857/S00444460X24060034, **EDN:** EZRMQF

## ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальный фармакологический скрининг соединений, структурной основой которых является бензимидазолпиримидиновая система, позволил выявить перспективные вещества, проявляющие противомикробную [1–5], противогрибковую [6], антипролиферативную [7], антиоксидантную [8], противотуберкулезную и противомаларийную [9] активность. Принимая во внимание высокий фармакологический потенциал данного класса соединений, актуальными являются исследования в области поиска способов их синтеза.

Известны примеры синтеза замещенных тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-2(1*H*)-онов в результате циклизации 2-аминобензимидазола с метиловым эфиром замещенной акриловой кислоты [10], метилциннаматом [11], диэтил-2-бензилиденмалонатом [12], а также рециклизации 1-арил-1*H*-пиррол-2,5-диона [13], 5-*R*-3-арил-метилен-3*H*-пиррол-2-она [14] под действи-

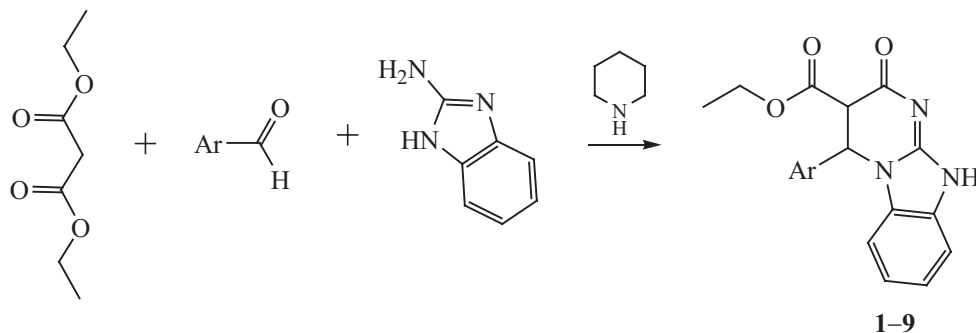
ем 1*H*-бензо[*d*]имидазол-2-амин. Применение поликомпонентных реакций для формирования аналогичной конденсированной гетероциклической системы изучено недостаточно, хотя представляется перспективным для расширения круга возможных производных бензимидазолпиримидинов и поиска новых биологически активных соединений.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе изучена трехкомпонентная реакция диэтилмалоната, ароматического альдегида, 2-аминобензимидазола при кипячении в этаноле в течение 4 ч в присутствии пиперидина в качестве основания. Проведенные исследования позволили установить, что единственными продуктами в данных условиях являются этил-4-арил-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилаты **1–9** (схема 1).

Соединения **1–9** представляют собой бесцветные кристаллические вещества, растворимые в ДМФА,

Схема 1.



Ar = 4-BrC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**1**), 4-ClC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**2**), 4-(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**3**), 4-CH<sub>3</sub>OC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**4**), 4-HOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**5**), 2,4-(CH<sub>3</sub>O)<sub>2</sub>C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (**6**), 4-(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**7**), 3-O<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**8**), 4-O<sub>2</sub>NC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (**9**).

ДМСО, уксусной кислоте, практически нерастворимые в воде.

Характерным для спектров ЯМР <sup>1</sup>H соединений **1–9** является наличие, наряду с сигналами ароматических протонов и связанных с ними групп, триплетов (0.96–1.10 м. д., *J* 8.0 Гц) и квартетов (4.07–4.13 м. д., *J* 8.0 Гц) этоксикарбонильной группы, дублетов атомов H<sup>3</sup> (4.19–4.35 м. д., *J* 4.0 Гц), H<sup>4</sup> (5.88–6.29 м. д., *J* 4.0 Гц), синглетов группы NH (11.37–12.03 м. д.). В спектрах ЯМР <sup>13</sup>C полученных соединений количество и характер сигналов соответствует предложенной структуре.

Пространственная структура соединения **1** установлена методом РСА. Монокристаллы соединения **1** получены медленной кристаллизацией из ацетонитрила. Полученные результаты РСА свидетельствуют о соответствии предложенной структуре (рис. 1).

Соединение **1** кристаллизуется в centrosymmetric пространственной группе моноклинной сингонии в виде рацемата (рис. 1). Кристаллы состоят из молекул одного диастереомера с *транс*-расположением этоксикарбонильного и арильного заместителей. Бензимидазольный фрагмент плоский.

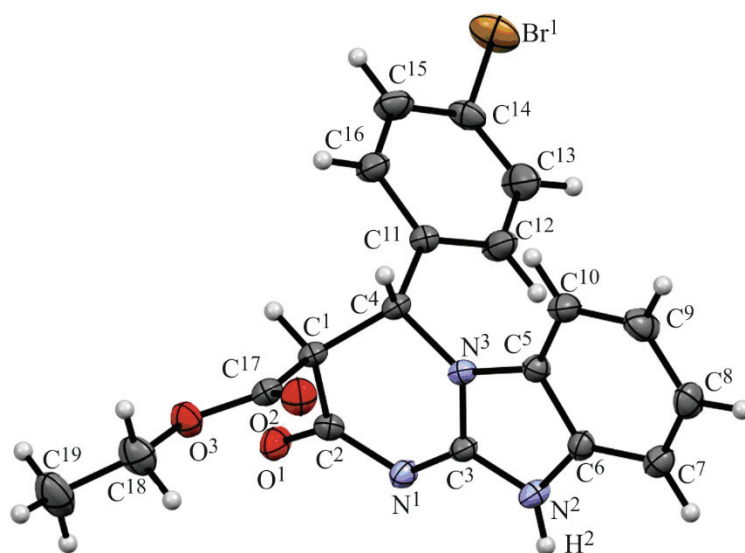


Рис. 1. Общий вид молекулы соединения **1** по данным РСА в представлении тепловыми эллипсоидами 30%-ной вероятности.

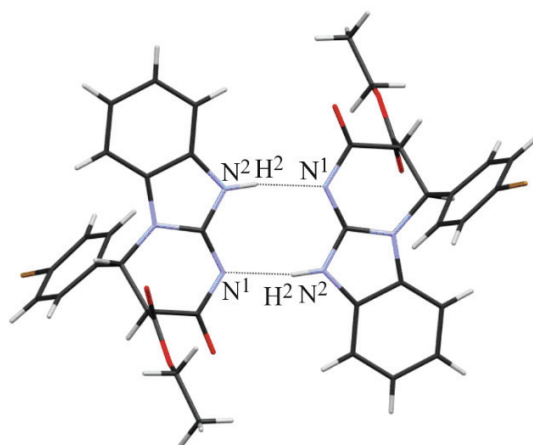


Рис. 2. Образование центросимметричных димеров в кристалле соединения 1.

Пиримидиновый цикл находится в конформации *искаженная ванна* с выходом атомов  $C^1$  и  $C^2$  из плоскости  $N^1C^3N^3C^4$  на 0.70 и 0.27 Å. Атом водорода  $H^2$  уточнен в качестве связанного с атомом  $N^2$ , так как возле атома  $N^2$  больше остаточной электронной плотности и при таком расположении  $H^2$  получены меньшие факторы расходимости. Распределение длин связей  $N^2-C^3$  [1.321(5) Å] и  $N^1=C^3$  [1.341(4) Å], напротив, свидетельствуют о расположении атома водорода у атома азота  $N^1$ . Такая неоднозначность, вероятно, возникает вследствие существования в кристалле обоих таутомеров или наличия водородных связей  $N^2-H^2 \cdots N^1$ , за счет которых молекулы в кристалле связаны в центросимметричные димеры (рис. 2).

## ВЫВОДЫ

Таким образом, трехкомпонентной реакцией диэтилмалоната с ароматическими альдегидами и 2-аминобензимидазолом в присутствии пиперидина в этаноле получены новые этил-4-арил-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилаты с выходом 54–78%.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры соединений зарегистрированы на спектрофотометре ИнфраЛЮМ ФТ-08 в таблетках KBr. Спектры ЯМР  $^1H$  и  $^{13}C$  записаны на приборе Bruker AVANCE 400SX с частотой 400 и 100 МГц в

ДМСО- $d_6$ , внутренний стандарт – ТМС. Элементный анализ проведен на приборе PerkinElmer 2400. Температуры плавления определены на приборе Melting Point M-565.

**Рентгеноструктурный анализ.** Рентгеноструктурный анализ выполнен на монокристалльном дифрактометре Xcalibur Ruby (Agilent Technologies) с CCD-детектором [ $MoK_\alpha$ -излучение, 295(2) К,  $\omega$ -сканирование с шагом  $1^\circ$ ]. Поглощение учтено эмпирически с использованием алгоритма SCALE3 ABSPACK [15]. Структура расшифрована с помощью программы SHELXT [16] и уточнена полноматричным МНК по  $F^2$  в анизотропном приближении для всех неводородных атомов с помощью программы SHELXL [17] с графическим интерфейсом OLEX2 [18]. Атомы водорода включены в уточнение в модели *наездника* (за исключением атомов водорода групп NH и  $NH_2$ , уточненных независимо в изотропном приближении).

Соединение 1, моноклинная сингония, пространственная группа  $P2_1/n$ ,  $C_{19}H_{16}BrN_3O_3$ ,  $M = 414.26$ ,  $a = 10.911(3)$  Å,  $b = 8.515(2)$  Å,  $c = 19.089(6)$  Å,  $\beta = 100.37(3)^\circ$ ,  $V = 1744.6(8)$  Å $^3$ ,  $Z = 4$ ,  $d_{\text{выч}} = 1.577$  г/см $^3$ ,  $\mu = 2.381$  мм $^{-1}$ . Окончательные параметры уточнения:  $R_1 = 0.0618$  [для 2219 отражений с  $I > 2\sigma(I)$ ],  $wR_2 = 0.1707$  (для всех 4102 независимых отражений,  $R_{\text{int}} = 0.0502$ ),  $S = 1.035$ . Результаты PCA зарегистрированы в Кембриджском центре кристаллографических данных (CCDC 2373066).

**Этил-4-(4-бромфенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (1).** Смесь 1.5 мл (0.01 моль) диэтилмалоната, 1.84 г (0.01 моль) 4-бромбензальдегида, 1.33 г (0.01 моль) 2-аминобензимидазола в 10 мл этанола в присутствии 1 мл (0.01 моль) пиперидина кипятили 4 ч. Осадок отфильтровывали, промывали горячим этанолом и сушили. Выход 3.22 г (78%), т. пл. 245–247°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.08 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.12 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.32 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.15 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.90 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.02 т (1H,  $\text{C}^7\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.13 т (1H,  $\text{C}^8\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.18 д (2H, ArH,  $J$  8.7 Гц), 7.48 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.62 д (2H, ArH,  $J$  8.7 Гц), 12.03 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 55.2, 55.3, 62.2, 110.1, 117.9, 121.8, 122.5, 122.6, 129.2, 129.8, 132.5, 132.6, 132.7, 136.6, 141.6, 148.0, 164.2, 166.9. Найдено, %: C 54.85; H 3.96; N 9.92.  $\text{C}_{19}\text{H}_{16}\text{BrN}_3\text{O}_3$ . Вычислено, %: C 55.09; H 3.89; N 10.14.

Соединения 2–9 получали аналогично.

**Этил-4-(4-хлорфенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (2).** В реакции использовали 4-хлорбензальдегид. Выход 2.73 г (74%), т. пл. 240–242°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.08 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.12 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.34 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.17 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.91 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.02 т (1H,  $\text{C}^7\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.13 т (1H,  $\text{C}^8\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.25 д (2H, ArH,  $J$  8.7 Гц), 7.47 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.49 д (2H, ArH,  $J$  8.7 Гц), 12.03 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 55.2, 55.3, 62.2, 110.1, 117.8, 121.8, 122.5, 128.9, 129.6, 132.7, 134.0, 136.1, 141.6, 147.9, 164.2, 166.9. Найдено, %: C 61.99; H 4.29; N 11.12.  $\text{C}_{19}\text{H}_{16}\text{ClN}_3\text{O}_3$ . Вычислено, %: C 61.71; H 4.36; N 11.36.

**Этил-4-(4-диметиламинофенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (3).** В реакции использовали 4-диметиламинобензальдегид. Выход 2.31 г (61%), т. пл. 234–236°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.08 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 2.85 с [3H,  $(\text{CH}_3)_2\text{NC}_6\text{H}_4$ ], 2.89 с [3H,  $(\text{CH}_3)_2\text{NC}_6\text{H}_4$ ], 4.10 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.26 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 5.91 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.71 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 6.78 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 6.95–7.10 м (4H, ArH,  $\text{C}^{7,8}\text{H}$ ), 7.44 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 11.82 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 40.3, 55.8, 56.0, 61.9, 110.4, 113.0, 118.0,

121.5, 122.1, 123.6, 127.0, 127.9, 133.0, 144.2, 151.0, 164.9, 167.2. Найдено, %: C 66.41; H 5.93; N 15.04.  $\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{N}_4\text{O}_3$ . Вычислено, %: C 66.65; H 5.85; N 14.81.

**Этил-4-(4-метоксифенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (4).** В реакции использовали 4-метоксибензальдегид. Выход 2.30 г (63%), т. пл. 222–224°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.08 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 3.75 с (3H,  $\text{CH}_3\text{OC}_6\text{H}_4$ ), 4.11 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.31 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.02 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.79 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 6.90–7.12 м (2H,  $\text{C}^{7,8}\text{H}$ ), 6.97 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 7.19 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 7.43 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 11.83 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.2, 55.6, 55.7, 55.8, 62.0, 110.2, 114.9, 114.9, 121.6, 122.2, 127.5, 128.5, 128.8, 132.9, 151.0, 160.0, 167.1, 167.8. Найдено, %: C 65.53; H 5.33; N 11.31.  $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{N}_3\text{O}_4$ . Вычислено, %: C 65.74; H 5.24; N 11.50.

**Этил-4-(4-гидроксифенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (5).** В реакции использовали 4-гидроксибензальдегид. Выход 2.53 г (72%), т. пл. 248–250°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.07 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.07 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.19 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 5.88 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.72–7.42 м (4H,  $\text{C}^{6-9}\text{H}$ ), 7.15 д (2H, ArH,  $J$  8.7 Гц), 7.61 д (2H, ArH,  $J$  8.7 Гц), 9.28 с (1H, OH), 11.85 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 55.4, 55.9, 61.9, 110.0, 116.2, 117.9, 121.2, 122.0, 127.6, 128.5, 129.8, 132.9, 142.5, 148.4, 157.8, 167.9. Найдено, %: C 65.22; H 4.96; N 11.80.  $\text{C}_{19}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}_4$ . Вычислено, %: C 64.95; H 4.88; N 11.96.

**Этил-4-(2,4-диметоксифенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (6).** В реакции использовали 2,4-диметоксибензальдегид. Выход 2.69 г (68%), т. пл. 232–234°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.10 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 3.73 с [6H,  $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{C}_6\text{H}_3$ ], 4.13 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.31 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.11 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.42 т (1H,  $\text{C}^7\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 6.49 т (1H,  $\text{C}^8\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 6.55 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.01 д (2H, ArH,  $J$  8.0 Гц), 6.48 с (1H, ArH), 6.63 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 11.69 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 48.8, 55.8, 56.2, 55.9, 60.7, 104.2, 110.6, 119.4, 121.2, 117.3, 118.9, 119.2, 120.0, 131.2, 133.0, 139.7, 148.3, 149.5, 159.3, 168.2. Найдено, %: C 64.08; H 5.42; N 10.81.  $\text{C}_{21}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{O}_5$ . Вычислено, %: C 63.79; H 5.35; N 10.63.

**Этил-4-(4-диэтиламинофенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (7).** В реакции использовали 4-диэтиламинобензальдегид. Выход 2.19 г (54%), т. пл. 239–241°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 0.96 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 1.04 м [6H,  $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NC}_6\text{H}_4$ ], 3.88 м [4H,  $(\text{CH}_3\text{CH}_2)_2\text{NC}_6\text{H}_4$ ], 4.11 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.22 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 5.90 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.45 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 6.61 т (1H,  $\text{C}^7\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 6.98 т (1H,  $\text{C}^8\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.01 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 7.30 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.42 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 11.58 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 12.9, 14.2, 44.2, 44.4, 54.4, 60.3, 88.3, 111.7, 114.3, 115.8, 118.8, 122.4, 129.4, 130.6, 132.6, 145.9, 148.2, 168.9, 169.6. Найдено, %: C 67.77; H 6.52; N 13.97.  $\text{C}_{23}\text{H}_{26}\text{N}_4\text{O}_3$ . Вычислено, %: C 67.96; H 6.45; N 13.78.

**Этил-4-(3-нитрофенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (8).** В реакции использовали 3-нитробензальдегид. Выход 2.85 г (75%), т. пл. 229–231°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.09 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.12 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.29 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.29 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.94 м (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ), 7.10 т (1H,  $\text{C}^8\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.44 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.61 д (1H, ArH,  $J$  7.8 Гц), 7.70 т (1H, ArH,  $J$  7.8 Гц), 8.14 с (1H, ArH), 8.23 д (1H, ArH,  $J$  7.8 Гц), 12.02 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 55.0, 55.1, 62.1, 109.7, 117.5, 121.4, 122.1, 122.3, 124.1, 131.3, 131.3, 132.7, 133.4, 140.0, 142.0, 164.6, 167.2. Найдено, %: C 60.24; H 4.33; N 14.49.  $\text{C}_{19}\text{H}_{16}\text{N}_4\text{O}_5$ . Вычислено, %: C 60.00; H 4.24; N 14.73.

**Этил-4-(4-нитрофенил)-2-оксо-2,3,4,10-тетрагидробензо[4,5]имидазо[1,2-*a*]пиримидин-3-карбоксилат (9).** В реакции использовали 4-нитробензальдегид. Выход 2.24 г (59%), т. пл. 221–223°C. Спектр ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $\delta$ , м. д.: 1.07 т (3H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.13 к (2H,  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCO}$ ,  $J$  8.0 Гц), 4.35 д (1H,  $\text{C}^3\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 6.16 д (1H,  $\text{C}^4\text{H}$ ,  $J$  4.0 Гц), 7.04 д (1H,  $\text{C}^6\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 7.13 м (2H,  $\text{C}^{7,8}\text{H}$ ), 7.36 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 7.50 д (1H,  $\text{C}^9\text{H}$ ,  $J$  8.0 Гц), 8.24 д (2H, ArH,  $J$  8.4 Гц), 11.37 с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$ ,  $\delta_{\text{C}}$ , м. д.: 14.3, 52.0, 56.5, 61.3, 109.8, 118.1, 121.6, 122.4, 124.7, 127.6, 130.1, 132.6, 142.4, 147.0, 147.9, 148.4, 167.2. Найдено, %: C 60.22; H 4.31; N 14.97.  $\text{C}_{19}\text{H}_{16}\text{N}_4\text{O}_5$ . Вычислено, %: C 60.00; H 4.24; N 14.73.

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Подчезерцева Карина Владимировна, ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-7473-5505>

Замараева Татьяна Михайловна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9932-9628>

Слепова Надежда Валентиновна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-3924-3715>

Дмитриев Максим Викторович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8817-0543>

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Федотов В.В., Русинов В.Л., Уломский Е.Н., Мухин Е.М., Горбунов Е.Б., Чупахин О.Н. // ХГС. 2021. Т. 57. № 4. С. 383; Fedotov V.V., Rusinov V.L., Ulomsky E.N., Mukhin E.M., Gorbunov E.B., Chupakhin O.N. // Chem. Heterocycl. Compd. 2021. Vol. 57. N 4. P. 383. doi 10.1007/6034
2. El-Hashash M.A.E.-A., Gomha S.M., El-Arab E.E. // Chem. Pharm. Bull. 2017. Vol. 65. P. 90. doi 10.1248/cpb.c16-00759
3. Farag A.M., Fahim A.M. // J. Mol. Struct. 2018. Vol. 1179. P. 304. doi 10.1016/j.molstruct.2018.11.008
4. Palaniraja J., Kumar S.S., Ramki S., Arunachalam P., Roopan S.M. // J. Mol. Liq. 2017. Vol. 230. P. 634. doi 10.1016/j.molliq.2017.01.010
5. Puttaraju K.B., Shivashankar K., Mahendra M., Rasal V.P., Venkata V.P.N., Rai K., Chanu M.B. // Eur. J. Med. Chem. 2013. Vol. 69. P. 316. doi 10.1016/j.ejmech.2013.07.015
6. Bondock S. // Res. Chem. Intermed. 2014. Vol. 41. P. 5451. doi 10.1007/s11164-014-1672-z
7. Jorda R., Reznickova E., Kielczewska U., Maj J., Morzycki J.W., Siergiejczyk L., Bazgier V., Berka K., Barova L., Wojtkielewicz A. // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 179. P. 483. doi 10.1016/j.ejmech.2019.06.040
8. Neochoritis C.G., Zarganes-Tzitzikas T., Tsoleridis C.A., Stephanidou-Stephanatou J., Kontogiorgis C.A., Hadji-pavlou-Litina D.J., Choli-Papadopoulou T. // Eur. J. Med. Chem. 2011. Vol. 46. P. 297. doi 10.1016/j.ejmech.2010.11.018
9. Prasad P., Kalola A.G., Patel M.P. // New J. Chem. 2018. Vol. 42. P. 12666. doi 10.1039/c8nj00670a
10. Ren C.L., Wang Y., Wang D., Chen Y.J., Liu L. // Sci. China Chem. 2010. Vol. 53. N 7. P. 1492. doi 10.1007/s11426-010-4033-9

11. Deng X.-Q., Quan L.-N., Song M.-X., Wei C.-X., Quan Z.-S. // *Eur. J. Med. Chem.* 2011. Vol. 46. P. 2955. doi 10.1016/j.ejmech.2011.04.020
12. Ковыгин Ю.А., Шихалиев Х.С., Потапов А.Ю., Крыльский Д.В. // *Химия и химическая технология.* 2005. Т. 48. Вып. 1. С. 59.
13. Ковыгин Ю.А., Крыльский Д.В., Зорина А.В., Шихалиев Х.С. // *ХГС.* 2004. № 9. С. 1404. Kovygin Yu.A., Krylski D.V., Zorina A.V., Shikhaliev Kh.S. // *Chem. Heterocycl. Compd.* 2004. Vol. 40. N 9. P. 1222. doi 10.1023/B:CHNC.0000048301.26073.e1
14. Бурухина О.В., Аниськова Т.В., Егорова А.Ю. // *Современные наукоемкие технологии.* 2012. Article 10.
15. CrysAlisPro, Rigaku Oxford Diffraction, 2022, Version 1.171.42.74a.
16. Sheldrick G.M. // *Acta Crystallogr. (A).* 2015. Vol. 71. P. 3. doi 10.1107/S2053273314026370
17. Sheldrick G.M. // *Acta Crystallogr. (C).* 2015. Vol. 71. N 3–8. doi 10.1107/S2053229614024218
18. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. // *J. Appl. Cryst.* 2009. Vol. 42. P. 339. doi 10.1107/S0021889808042726

## Synthesis and Structure of Ethyl 4-Aryl-2-oxo-2,3,4,10-tetrahydrobenzo[4,5]imidazo[1,2-*a*]pyrimidine-3-carboxylates

K. V. Podchezertseva<sup>1</sup>, T. M. Zamaraeva<sup>1,\*</sup>, N. V. Slepova<sup>1</sup>, and M. V. Dmitriev<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Perm State Pharmaceutical Academy of the Ministry of Health of the Russian Federation, Perm, 614990 Russia

<sup>2</sup> Perm State National Research University, Perm, 614990 Russia

\*e-mail: tanyapgfa@yandex.ru

Received July 31, 2024; revised September 16, 2024; accepted September 20, 2024

Ethyl 4-aryl-2-oxo-2,3,4,10-tetrahydrobenzo[4,5]imidazo[1,2-*a*]pyrimidine-3-carboxylates were prepared by three-component one-pot condensation of diethylmalonate, aromatic aldehyde, 2-aminobenzimidazole in ethanol in the presence of piperidine. The structure of the obtained compounds was determined by <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR spectroscopy and single crystal X-ray diffraction analysis.

**Keywords:** malonic acid diethyl ether, arylaldehydes, 2-aminobenzimidazole, piperidine, three-component reaction