

**СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ ТИАЗОЛ-2-ИЛАЦЕТАМИДОВ.  
МОЛЕКУЛЯРНАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА  
N-(4-МЕТОКСИФЕНИЛ)-2-ОКСО-2-(4-ФЕНИЛТИАЗОЛ-2-ИЛ)АЦЕТАМИДА**

© И. В. Дяченко, В. Д. Дяченко\*

Луганский национальный университет имени Т. Шевченко  
Украина, 91011, Луганск, ул. Оборонная, 2; e-mail: dyachvd@mail.ru

*Взаимодействием 3-амино-3-тиоксопропанамидов с  $\alpha$ -бромкетонами синтезированы замещенные тиазол-2-илацетамиды. Строение N-(4-метоксифенил)-2-оксо-2-(4-фенилтиазол-2-ил)-ацетамида изучено методом РСА.*

**Ключевые слова:** 3-амино-3-тиоксопропанамиды,  $\alpha$ -бромкетоны, тиазол-2-илацетамиды, рентгеноструктурный анализ.

3-Амино-3-тиоксопропанамиды используются в органическом синтезе преимущественно в качестве СН-кислот при получении функционально замещенных пиридинов по реакции Михаэля [1–4]. Известно также их применение в качестве С-нуклеофилов в реакциях нуклеофильного винильного замещения [5, 6] и конденсации с карбонильными соединениями [7, 8]. Их алкилирование представлено лишь в одной работе [9]: синтезированы S-метилпроизводные.

В продолжение исследований по химии данного типа реагентов [10–13] нами изучено взаимодействие 3-амино-3-тиоксопропанамидов (Ia, б) с  $\alpha$ -бромкетонами (IIa–e) при 20°C в растворе ДМФА.

Установлено, что данная реакция приводит к образованию замещенных тиазолов Ганча (IIIa–e), перспективных полупродуктов для создания препаратов с противомикробным [14, 15] и противоопухолевым действием [16, 17]. Среди них обнаружены вещества, эффективные против болезни Альцгеймера [18] и в качестве флуоресцентных зондов [19].

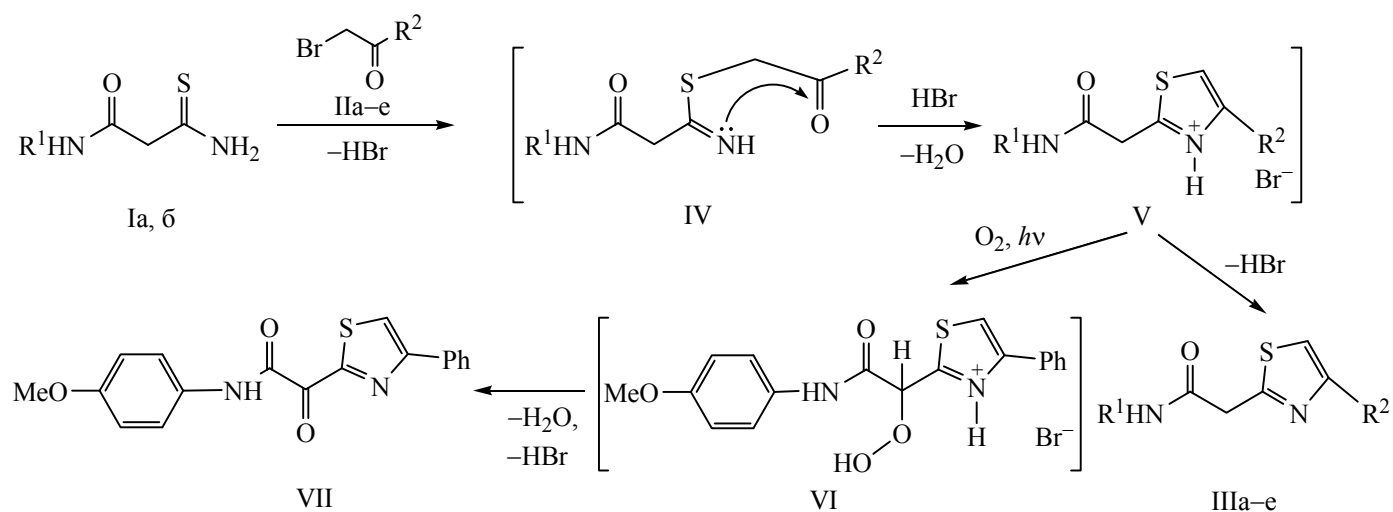
Реакция включает, по-видимому, образование интермедиата (IV), внутримолекулярно циклизующегося в замещенный тиазолийбромид (V). В результате гидролиза он стабилизируется в виде тиазола (III). При использовании в качестве исходных реагентов тиоамида (Ia) и фенацилбромид (IIa) реакция не останавливается на стадии образования

тиазола типа (III). Наличие  $\pi$ -дефицитной системы в виде катиона тиазолия возле метиленовой группы в интермедиате (V) способствует его легкому автоокислению [20] кислородом воздуха при выдерживании раствора на свету, что приводит к пероксиду (VI). Последний при отщеплении воды и бромоводорода образует N-(4-метоксифенил)-2-оксо-2-(4-фенилтиазол-2-ил)ацетамид (VII).

Спектральные характеристики подтверждают строение соединений (IIIa–e, IV). Так, характерным для ИК спектров является наличие полос поглощения валентных колебаний карбонильных групп при 1658–1714 см<sup>-1</sup>. В спектрах ЯМР <sup>1</sup>H соединений (IIIa–e) наблюдается сигнал протонов метиленовой группы в виде синглета при 3.91–4.41 м. д. Масс-спектр соединения (IIIe) содержит низкоинтенсивный пик иона [M + 2]<sup>+</sup>, что подтверждает наличие в его молекуле атома серы [21]. Наличие пика молекулярного иона с четным численным значением подтверждает четное число атомов азота в молекуле соединения (IV) [22]. Спектр ЯМР <sup>13</sup>C соединения (VII) содержит сигналы всех атомов углерода в характерных областях  $\delta$ .

Строение соединения (VII) изучено методом рентгеноструктурного анализа (рис. 1–3, табл. 1, 2).

В независимой части элементарной ячейки содержатся две молекулы соединения (VII), которые имеют близкие геометрические параметры. Оксоацетамидный фрагмент лежит в плоскости тиазол-



I,  $\text{R}^1 = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$  (а), H (б); II,  $\text{R}^2 = \text{Ph}$  (а),  $4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$  (б), кумарин-3-ил (в),  $4\text{-MeC}_6\text{H}_4$  (г), 3-оксо-3*H*-бензо[*f*]хромен-2-ил (д),  $4\text{-NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$  (е); III,  $\text{R}^1 = \text{R}^2 = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$  (а);  $\text{R}^1 = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$ ,  $\text{R}^2 = 3\text{-оксо-3H-бензо[}f\text{]хромен-2-ил}$  (б);  $\text{R}^1 = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$ ,  $\text{R}^2 = \text{кумарин-3-ил}$  (в);  $\text{R}^1 = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$ ,  $\text{R}^2 = 4\text{-NO}_2\text{C}_6\text{H}_4$  (г);  $\text{R}^1 = \text{H}$ ,  $\text{R}^2 = 4\text{-MeC}_6\text{H}_4$  (д);  $\text{R}^1 = \text{H}$ ,  $\text{R}^2 = \text{кумарин-3-ил}$  (е).

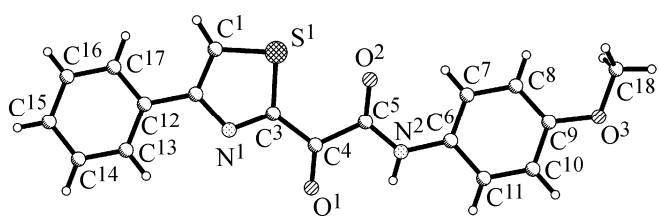


Рис. 1. Общий вид молекулы соединения (VII).

ного цикла [углы между средними плоскостями составляют  $7.1^\circ$  в молекуле (А) и  $6.6^\circ$  в молекуле (В)]. Метоксифенильный заместитель практически компланарен оксоацетамидному фрагменту [торсионный угол  $\text{C}^5\text{N}^2\text{C}^6\text{C}^7 - 23.4(3)^\circ$  (А),  $-13.8(3)^\circ$  (В)]. При этом образуется внутримолекулярная водородная связь  $\text{C}^7\text{-H}^7 \cdots \text{O}^2$  [ $\text{H} \cdots \text{O}$  2.30 (А), 2.28 Å (В),  $\text{C-H} \cdots \text{O}$  117 (А),  $121^\circ$  (В)]. В молекуле (В) фенильный

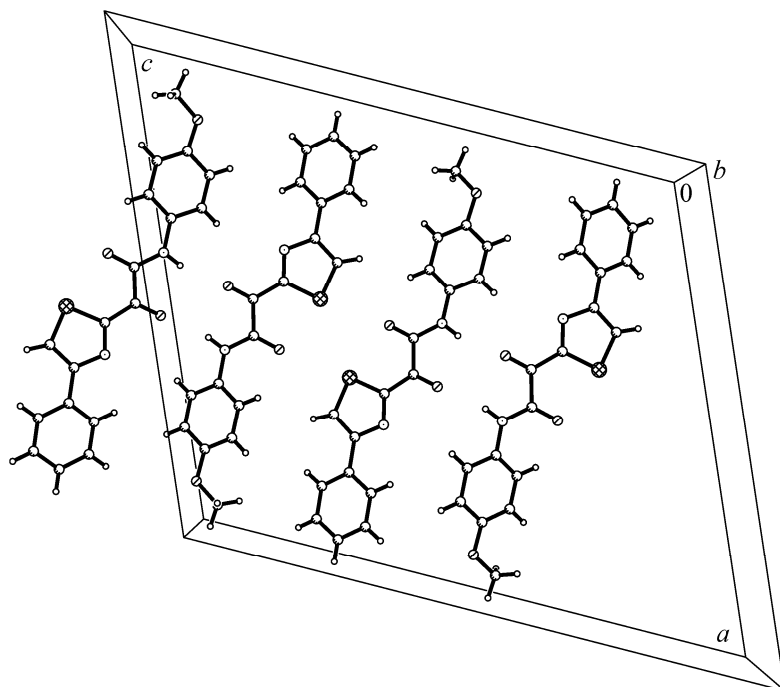


Рис. 2. Упаковка молекул соединения (VII) в кристалле.

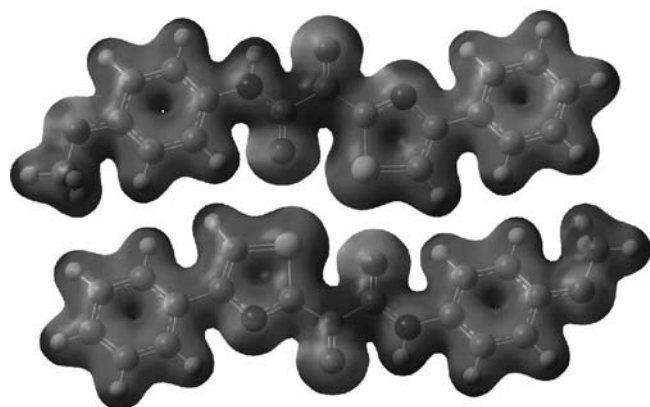


Рис. 3. Рассчитанная карта электростатического потенциала в димере молекул соединения (VII), связанных  $\sigma$ -дырочными связями O...S (экспериментальная геометрия, B3LYP/TZVP, изоповерхность по значению электронной плотности 0.025 а. е.)

Таблица 1

Длины связей (Å) в молекуле соединения (VII)

Связь	A	B
S <sup>1</sup> -C <sup>1</sup>	1.6778(19)	1.6788(19)
S <sup>1</sup> -C <sup>3</sup>	1.7120(16)	1.7162(16)
O <sup>1</sup> -C <sup>4</sup>	1.2124(19)	1.2074(19)
O <sup>2</sup> -C <sup>5</sup>	1.2147(19)	1.220(2)
O <sup>3</sup> -C <sup>9</sup>	1.3755(19)	1.370(2)
O <sup>3</sup> -C <sup>18</sup>	1.417(2)	1.413(2)
N <sup>1</sup> -C <sup>2</sup>	1.368(2)	1.358(2)
N <sup>1</sup> -C <sup>3</sup>	1.316(2)	1.315(2)
N <sup>2</sup> -C <sup>5</sup>	1.334(2)	1.334(2)
N <sup>2</sup> -C <sup>6</sup>	1.416(2)	1.418(2)
C <sup>1</sup> -C <sup>2</sup>	1.371(2)	1.370(2)
C <sup>2</sup> -C <sup>12</sup>	1.474(2)	1.475(2)
C <sup>3</sup> -C <sup>4</sup>	1.471(2)	1.468(2)
C <sup>4</sup> -C <sup>5</sup>	1.535(2)	1.534(2)
C <sup>6</sup> -C <sup>7</sup>	1.384(2)	1.388(2)
C <sup>6</sup> -C <sup>11</sup>	1.388(2)	1.388(2)
C <sup>7</sup> -C <sup>8</sup>	1.386(2)	1.384(2)
C <sup>8</sup> -C <sup>9</sup>	1.375(2)	1.377(3)
C <sup>9</sup> -C <sup>10</sup>	1.384(2)	1.384(2)
C <sup>10</sup> -C <sup>11</sup>	1.376(2)	1.375(2)
C <sup>12</sup> -C <sup>13</sup>	1.383(2)	1.381(2)
C <sup>12</sup> -C <sup>17</sup>	1.389(2)	1.391(3)
C <sup>13</sup> -C <sup>14</sup>	1.383(2)	1.381(3)
C <sup>14</sup> -C <sup>15</sup>	1.379(3)	1.368(3)
C <sup>15</sup> -C <sup>16</sup>	1.374(3)	1.376(3)
C <sup>16</sup> -C <sup>17</sup>	1.375(2)	1.377(3)

Таблица 2

Валентные углы (град) в молекуле соединения (VII)

Угол	A	B
C <sup>1</sup> S <sup>1</sup> C <sup>3</sup>	89.27(8)	89.23(9)
C <sup>9</sup> O <sup>3</sup> C <sup>18</sup>	116.91(15)	117.49(16)
C <sup>3</sup> N <sup>1</sup> C <sup>2</sup>	110.33(13)	110.80(14)
C <sup>5</sup> N <sup>2</sup> C <sup>6</sup>	126.04(14)	127.81(14)
C <sup>2</sup> C <sup>1</sup> S <sup>1</sup>	111.53(13)	111.41(14)
N <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>1</sup>	113.95(15)	114.09(15)
N <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>12</sup>	120.00(14)	119.60(15)
C <sup>1</sup> C <sup>2</sup> C <sup>12</sup>	126.04(16)	126.31(16)
N <sup>1</sup> C <sup>3</sup> S <sup>1</sup>	114.91(13)	114.46(13)
N <sup>1</sup> C <sup>3</sup> C <sup>4</sup>	120.64(14)	121.07(14)
C <sup>4</sup> C <sup>3</sup> S <sup>1</sup>	124.42(13)	124.47(13)
O <sup>1</sup> C <sup>4</sup> C <sup>3</sup>	122.63(15)	122.01(15)
O <sup>1</sup> C <sup>4</sup> C <sup>5</sup>	120.08(15)	119.92(15)
C <sup>3</sup> C <sup>4</sup> C <sup>5</sup>	117.29(14)	118.07(15)
O <sup>2</sup> C <sup>5</sup> N <sup>2</sup>	125.74(16)	125.84(16)
O <sup>2</sup> C <sup>5</sup> C <sup>4</sup>	120.17(15)	120.87(15)
N <sup>2</sup> C <sup>5</sup> C <sup>4</sup>	114.09(14)	113.29(15)
C <sup>7</sup> C <sup>6</sup> N <sup>2</sup>	122.37(15)	122.87(15)
C <sup>7</sup> C <sup>6</sup> C <sup>11</sup>	119.37(15)	119.21(16)
C <sup>11</sup> C <sup>6</sup> N <sup>2</sup>	118.26(15)	117.91(15)
C <sup>6</sup> C <sup>7</sup> C <sup>8</sup>	120.11(16)	120.14(17)
C <sup>9</sup> C <sup>8</sup> C <sup>7</sup>	120.28(16)	120.33(17)
O <sup>3</sup> C <sup>9</sup> C <sup>10</sup>	115.86(15)	115.20(16)
C <sup>8</sup> C <sup>9</sup> O <sup>3</sup>	124.45(16)	125.33(16)
C <sup>8</sup> C <sup>9</sup> C <sup>10</sup>	119.69(16)	119.47(16)
C <sup>11</sup> C <sup>10</sup> C <sup>9</sup>	120.34(16)	120.56(17)
C <sup>10</sup> C <sup>11</sup> C <sup>6</sup>	120.17(16)	120.19(16)
C <sup>13</sup> C <sup>12</sup> C <sup>2</sup>	120.75(16)	120.25(16)
C <sup>13</sup> C <sup>12</sup> C <sup>17</sup>	118.70(16)	118.32(17)
C <sup>17</sup> C <sup>12</sup> C <sup>2</sup>	120.55(16)	121.42(17)
C <sup>12</sup> C <sup>13</sup> C <sup>14</sup>	120.44(18)	120.58(19)
C <sup>15</sup> C <sup>14</sup> C <sup>13</sup>	120.27(19)	120.8(2)
C <sup>16</sup> C <sup>15</sup> C <sup>14</sup>	119.52(19)	119.23(19)
C <sup>15</sup> C <sup>16</sup> C <sup>17</sup>	120.45(19)	120.5(2)
C <sup>16</sup> C <sup>17</sup> C <sup>12</sup>	120.63(18)	120.62(19)

заместитель лежит практически в плоскости тиазольного цикла [торсионный угол C<sup>1</sup>C<sup>2</sup>C<sup>12</sup>C<sup>17</sup> 7.3(3)°], что приводит к образованию укороченного внутримолекулярного контакта H<sup>1</sup>...H<sup>17</sup> 2.27 Å при

сумме ван-дер-ваальсовых радиусов 2.32 Å [23]. В молекуле (А) такого укороченного контакта не наблюдается из-за небольшого поворота фенильного заместителя относительно тиазольного цикла [торсионный угол  $C^1C^2C^{12}C^{17}$  19.2(3)°].

В кристалле молекулы связаны в димеры А...В межмолекулярными водородными связями  $N^{2A} \cdots H^{2A} \cdots O^{1B}$  ( $H \cdots O$  2.16 Å,  $N-H \cdots O$  161°) и  $N^{2B} \cdots H^{2B} \cdots O^{1A}$  ( $H \cdots O$  2.30 Å,  $N-H \cdots O$  164°) (рис. 2). Эти димеры связаны в цепочки вдоль оси *c* за счет взаимодействий между молекулами (А) и (В), которые характеризуются межмолекулярными контактами  $O^{2A} \cdots S^{1B}$  3.16 и  $O^{2B} \cdots S^{1A}$  3.08 Å (сумма ван-дер-ваальсовых радиусов 3.11 Å).

По всей видимости, межмолекулярные взаимодействия  $S \cdots O$  можно охарактеризовать как  $\sigma$ -дырочные связи, о чем свидетельствует близость к 180° углов  $C^3-S^1 \cdots O^2$  147–162°. Для подтверждения этого предположения был проведен квантовохимический расчет электростатического потенциала димера молекул (VII) (рис. 3). Из рисунка видно, что область положительного электростатического потенциала, которая присутствует на продолжении связи  $C^3-S^1$ , ориентирована к области отрицательного электростатического потенциала атома  $O^2$  соседней молекулы. Кроме этого, в молекуле также присутствует внутримолекулярная  $\sigma$ -дырочная связь  $S^1 \cdots O^2$  [2.68 (А), 2.72 Å (В)] между областью положительного электростатического потенциала на продолжении связи  $C^1-S^1$  и областью отрицательного потенциала неподеленной пары электронов атома кислорода. Существование подобных внутримолекулярных связей  $S \cdots O$  было доказано ранее [24].

#### Экспериментальная часть

ИК спектры записывали на приборе UR-20 в таблетках KBr. Спектры ЯМР  $^1H$  и  $^{13}C$  регистрировали на спектрометре Varian-Gemini (400.13 и 100 МГц соответственно) в растворах  $DMCO-d_6$ , внутренний стандарт – ТМС. Элементный анализ выполняли на микроанализаторе EuroVector EA-3000. Хромато-масс-спектры получали на приборе Agilent 1100/DAD/HSD/VLG 119562 и MX-1321 (70 эВ) с прямым вводом вещества в ионный источник. Температуры плавления определяли на блоке Кофлера. Контроль за ходом реакции осуществляли методом ТСХ на пластинках Silufol UV-254 в системе ацетон–гексан (3:5), проявитель – пары иода и УФ облучение.

**Рентгеноструктурный анализ.** Кристаллы соединения (VII) моноклинные,  $C_{18}H_{14}N_2O_3S$ , при 298 К: *a* 20.1357(11), *b* 7.1124(6), *c* 23.4523(14) Å,  $\beta$  112.893(7)°, *V* 3094.1(4) Å<sup>3</sup>, *M* 338.37, *Z* 2, пространственная группа  $P2_1/c$ ,  $d_{выч}$  1.45 г/см<sup>3</sup>,  $\mu(MoK_\alpha)$  0.229 мм<sup>-1</sup>, *F*(000) 1408. Параметры элементарной ячейки и интенсивности 25420 отражений (9784 независимых,  $R_{int}$  0.044) измерены на автоматическом четырехкружном диффрактометре Xcalibur ( $MoK_\alpha$ , графитовый монохроматор, CCD-детектор,  $\omega$ -сканирование,  $2\theta_{max}$  64.02°).

Структура расшифрована прямым методом по комплексу программ SHELX-97 [25]. Положения атомов водорода рассчитаны геометрически и уточнены по модели *наездника* с  $U_{изо} = nU_{экр}$  несущего атома ( $n = 1.5$  для метильной группы и  $n = 1.2$  для остальных атомов водорода). Структура уточнена по  $F^2$  полноматричным МНК в анизотропном приближении для неводородных атомов до  $wR_2 = 0.143$  по 9784 отражениям [ $R_1$  0.053 по 5512 отражениям с  $F > 4\sigma(F)$ , *S* 1.01]. Длины связей и валентные углы приведены в табл. 1, 2 соответственно.

**3-Амино-N-(4-метоксифенил)-3-тиоксопропанамида (Ia)** получали по методике [8]. Сиреневые пластинчатые кристаллы, т. пл. 138–139°C (т. пл. 143–144°C [8]). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.64 с (2H,  $CH_2$ ), 3.72 с (3H, Me), 6.84 д (2H,  $H_{аром}$ , *J* 8.0 Гц), 7.51 д (2H,  $H_{аром}$ , *J* 8.0 Гц), 9.36 уш. с (1H,  $NH_2$ ), 9.64 уш. с (1H,  $NH_2$ ), 9.97 уш. с (1H, NH).

**3-Амино-3-тиоксопропанамида** получали по методике [8]. Желтые кристаллы, т. пл. 105–107°C (т. пл. 103–105°C [8]). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.42 с (2H,  $CH_2$ ), 6.96 уш. с (1H,  $CONH_2$ ), 7.41 уш. с (1H,  $CONH_2$ ), 9.29 уш. с (1H,  $CSNH_2$ ), 9.43 уш. с (1H,  $CSNH_2$ ).

**Замещенные тиазол-2-илацетамиды (IIIa–e) и N-(4-метоксифенил)-2-оксо-2-(4-фенилтиазол-2-ил)ацетамид (VII)** (общая методика). К перемешиваемому раствору 10 ммоль тиоксопропанамида (Ia, б) в 20 мл ДМФА при 20°C прибавляли 10 ммоль соответствующего  $\alpha$ -бромкетона (III). Смесь перемешивали в течение 2 ч и оставляли на 48 ч. Затем реакционную смесь разбавляли равным объемом воды и оставляли на 4 сут. Образовавшийся осадок отфильтровывали, промывали последовательно водой, этанолом и гексаном.

**N-(4-Метоксифенил)-2-[4-(4-метоксифенил)-тиазол-2-ил]ацетамид (IIIa).** Выход 2.9 г (82%), желтый порошок, т. пл. 151–152°C (PrOH). ИК спектр,  $\nu$ , см<sup>-1</sup>: 3300 (NH), 1672 (CONH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.74 с (3H, MeO), 3.84 с (3H, MeO), 4.08 с (2H,  $CH_2$ ), 6.77 д (2H,  $H_{аром}$ , *J* 8.5 Гц), 6.88 д

(2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.4 Гц), 7.45 с (1H,  $C^5H$ , тиазол), 7.51 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.5 Гц), 7.79 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.4 Гц), 10.01 уш. с (1H, NH). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 355 (100)  $[M + 1]^+$ . Найдено, %: С 64.25; Н 5.01; N 7.84.  $C_{19}H_{18}N_2O_3S$ . Вычислено, %: С 64.39; Н 5.12; N 7.90.  $M$  354.425.

**N-(4-Метоксифенил)-2-[4-(3-оксо-3H-бензо[*f*]-хромен-2-ил)тиазол-2-ил]ацетамид (Шб).** Выход 2.7 г (62%), желтый порошок, т. пл. 216–217°C (ДМФА), т. субл. 170°C. ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 3314 (NH), 1711 (C=O), 1666 (CONH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.76 с (3H, Me), 4.18 с (2H,  $CH_2$ ), 7.82 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.6 Гц), 7.45–7.61 м (3H,  $H_{\text{аром}}$ ), 7.73 т (1H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.1 Гц), 7.96 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.6 Гц), 8.07 д (1H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.3 Гц), 8.42 с (1H,  $C^5H$ , тиазол), 8.46 д (1H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.4 Гц), 9.49 с (1H,  $C^1H$ , хромен), 10.06 уш. с (1H, NH). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 443 (100)  $[M + 1]^+$ . Найдено, %: С 67.74; Н 3.98; N 6.28.  $C_{25}H_{18}N_2O_4S$ . Вычислено, %: С 67.86; Н 4.10; N 6.33.  $M$  442.492.

**N-(4-Метоксифенил)-2-[4-(2-оксо-2H-хромен-3-ил)тиазол-2-ил]ацетамид (Шв).** Выход 3.0 г (76%), бесцветный порошок, т. пл. 201–202°C (BuOH). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 3296 (NH), 1702 (C=O), 1670 (CONH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.72 с (3H, Me), 4.21 с (2H,  $CH_2$ ), 6.91 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.7 Гц), 7.39 т (1H,  $C^7H$ , кумарин,  $J$  8.1 Гц), 7.47 д (1H,  $C^5H$ , кумарин,  $J$  8.1 Гц), 7.54 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.7 Гц), 7.65 т (1H,  $C^6H$ , кумарин,  $J$  8.1 Гц), 7.94 д (1H,  $C^8H$ , кумарин,  $J$  8.1 Гц), 8.36 с (1H,  $C^5H$ , тиазол), 8.77 с (1H,  $C^4H$ , кумарин), 10.26 уш. с (1H, NH). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 393 (100)  $[M + 1]^+$ . Найдено, %: С 64.18; Н 3.95; N 7.02.  $C_{21}H_{16}N_2O_4S$ . Вычислено, %: С 64.27; Н 4.11; N 7.14.  $M$  392.432.

**N-(4-Метоксифенил)-2-[4-(4-нитрофенил)тиазол-2-ил]ацетамид (Шг).** Выход 2.8 г (76%), желтый порошок, т. пл. 189–190°C (AcOH). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 3315 (NH), 1662 (CONH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 4.02 с (3H, Me), 4.41 с (2H,  $CH_2$ ), 7.06 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.6 Гц), 7.77 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.6 Гц), 8.38 с (1H,  $C^5H$ , тиазол), 8.44 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.3 Гц), 8.53 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.3 Гц), 10.33 уш. с (1H, NH). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 370 (100)  $[M + 1]^+$ . Найдено, %: С 58.45; Н 3.92; N 11.24.  $C_{18}H_{15}N_3O_4S$ . Вычислено, %: С 58.53; Н 4.09; N 11.36.  $M$  369.397.

**2-[5-(*n*-Толил)тиазол-2-ил]ацетамид (Шд).** Выход 1.7 г (75%), бесцветные игольчатые кристаллы, т. пл. 131°C (EtOH). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 3390, 3300, 3280 (NH<sub>2</sub>), 1680 (CONH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 2.35 с (3H, Me), 3.91 с (2H,  $CH_2$ ), 7.11 уш. с (1H, NH<sub>2</sub>), 7.22 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  7.7 Гц), 7.59 уш. с (1H, NH<sub>2</sub>), 7.82 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  7.7 Гц), 7.85 с (1H,

$C^5H$ , тиазол). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 234 (4)  $[M + 2]^+$ , 233 (9)  $[M + 1]^+$ , 232 (59)  $[M]^+$ , 215 (2)  $[M - NH_3]^+$ , 189 (100)  $[M - CH_3CO]^+$ , 148 (35), 134 (12), 115 (11), 91 (6)  $[PhCH_2]^+$ , 77 (5)  $[Ph]^+$ , 44 (9)  $[CS]^+$ . Найдено, %: С 61.96; Н 5.02; N 11.94.  $C_{12}H_{12}N_2OS$ . Вычислено, %: С 62.05; Н 5.21; N 12.06.  $M$  232.303.

**2-[5-(2-Оксо-2H-хромен-3-ил)тиазол-2-ил]ацетамид (Ше).** Выход 2.3 г (82%), бесцветный порошок, т. пл. 211–213°C (BuOH). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 3402, 3385, 3287 (NH<sub>2</sub>), 1714 (C=O), 1671 (CONH). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.91 с (2H,  $CH_2$ ), 7.05 уш. с (1H, NH<sub>2</sub>), 7.21–7.42 м (2H,  $H_{\text{аром}}$ , NH<sub>2</sub>), 7.44–7.65 м (2H,  $H_{\text{аром}}$ ), 7.78 д (1H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  7.6 Гц), 8.28 с (1H,  $C^5H$ , тиазол), 8.73 с (1H,  $C^4H$ , кумарин). Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 287 (100)  $[M + 1]^+$ . Найдено, %: С 58.64; Н 3.43; N 9.66.  $C_{14}H_{10}N_2O_3S$ . Вычислено, %: С 58.73; Н 3.52; N 9.78.  $M$  286.308.

**N-(4-Метоксифенил)-2-оксо-2-(4-фенилтиазол-2-ил)ацетамид (VII).** Выход 2.2 г (66%), желтые игольчатые кристаллы, т. пл. 198–200°C (BuOH). ИК спектр,  $\nu$ ,  $cm^{-1}$ : 3322 (NH), 1658 (C=O). Спектр ЯМР  $^1H$ ,  $\delta$ , м. д.: 3.78 с (3H, Me), 6.87 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.5 Гц), 7.35 т (1H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  7.0 Гц), 7.44 т (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  7.5 Гц), 7.75 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  8.5 Гц), 8.03 д (2H,  $H_{\text{аром}}$ ,  $J$  7.0 Гц), 10.81 уш. с (1H, NH). Спектр ЯМР  $^{13}C$ ,  $\delta_C$ , м. д.: 55.73, 114.57, 122.34, 124.98, 126.87, 129.42, 129.51, 130.97, 133.54, 156.79, 157.12, 159.38, 160.48, 178.84. Масс-спектр,  $m/z$  ( $I_{\text{отн}}$ , %): 339 (100)  $[M + 1]^+$ . Найдено, %: С 63.78; Н 4.00; N 8.11.  $C_{18}H_{14}N_2O_3S$ . Вычислено, %: С 63.89; Н 4.17; N 8.28.  $M$  338.384.

#### Список литературы

- [1] Краузе А., Дубурс Г. // ХГС. 1999. № 4. С. 506.
- [2] Krauze A., Popelis J., Duburs G. // Heterocycl. Commun. 1997. Vol. 3. N 6. P. 515.
- [3] Родиновская Л.А., Шестопалов А.М., Нестеров В.Н. // ХГС. 1996. № 10. С. 1376.
- [4] Красников Д.А., Дяченко В.Д., Шишкина С.В., Шихин О.В. // ЖОХ. 2010. Т. 80. Вып. 2. С. 305; Krasnikov D.A., Dyachenko V.D., Shishkina O.V. // Russ. J. Gen. Chem. 2010. Vol. 80. N 2. P. 330. DOI: 10.1134/S1070363210020234.
- [5] Дяченко И.В., Вовк М.В. // ЖОХ. 2012. Т. 82. Вып. 2. С. 256; Dyachenko I.V., Vovk M.V. // Russ. J. Gen. Chem. 2012. Vol. 82. N 2. P. 251. DOI: 10.1134/S1070363212020156.
- [6] Дяченко В.Д., Битюкова О.С., Дяченко А.Д. // ЖОХ. 2011. Т. 47. Вып. 9. С. 1317; Dyachenko V.D., Bitukova O.S.,

- Dyachenko A.D.* // Russ. J. Org. Chem. 2011. Vol. 47. N 9. P. 1335. DOI: 10.1134/S1070428011090132.
- [7] Дяченко В.Д., Карпов Е.Н. // ЖОХ. 2013. Т. 83. Вып. 7. С. 1143; *Dyachenko V.D., Karpov E.N.* // Russ. J. Gen. Chem. 2013. Vol. 83. N 7. P. 1394. DOI: 10.1134/S1070363213070153.
- [8] *Schaper W.* // Synthesis. 1985. N 9. P. 861. DOI: 10.1055/s-1985-31365.
- [9] *Sasse K.* // Lieb. Ann. Chem. 1976. N 4. P. 768. DOI: 10.1002/jlac.197619760419.
- [10] Дяченко В.Д., Красников Д.А., Хорик М. В. // ХГС. 2008. № 7. С. 1018; *Dyachenko V.D., Krasnikov D.A., Khorik M.V.* // Chem. Heterocyclic Compounds. 2008. Vol. 44. N 7. P. 815. DOI: 10.1007/s10593-008-0114-5.
- [11] Дяченко И.В., Вовк М.В. // Укр. хим. ж. 2013. Т. 79. № 2. С. 114.
- [12] Дяченко В.Д., Карпов Е.Н., Феськов И.А. // ЖОХ. 2013. Т. 83. Вып. 9. С. 1496; *Dyachenko V.D., Karpov E.N., Feskov I.A.* // Russ. J. Gen. Chem. 2013. Vol. 83. N 9. P. 1716. DOI: 10.1134/S1070363213090156.
- [13] Дяченко В.Д., Ткачев Р.П. // ЖОРХ. 2003. Т. 39. Вып. 8. С. 1245; *Dyachenko V.D., Tkachev R.P.* // Russ. J. Org. Chem. 2003. Vol. 39. N 8. P. 1174. DOI: 10.1023/B:RUJO.0000010189.83376.ca.
- [14] *Abdelhamid A.O., Al-Atoom A.A.* // Phosphorus, Sulfur, Silicon, Relat. Elem. 2005. Vol. 180. N 7. P. 1629. DOI: 10.1080/104265090885048.
- [15] *Bender W., Betz U., Kleymann G., Baumeister J., Eckenberg P., Fischer R., Handke-Ergueden G., Hendrix M., Henninger K., Jensen A., Keldenich J., Reefschloger J., Schmidt T., Schneider U., Weber O.* Pat. 10210319 (2003). Germany // РЖХим. 2004. 04.22–19О114П.
- [16] *Pevarello P., Amici R., Villa M., Salom B., Vulpetti A., Varasi M.* Pat. 6784198 (2004). USA // РЖХим. 2005. 05.07–19О135П.
- [17] *Sanner M.A., Helal C.J., Cooper C.B.* Pat. 6720427 (2004). USA // РЖХим. 2005. 05.04–19О172П.
- [18] *Rawlins D.B., Kimball D.S., Kim K.S., Misra R.N., Webster K.R.* Pat. 6720347 (2004). USA // РЖХим. 2005. 05.06–19О158П.
- [19] Кузів Я.Б., Іщенко В.В., Хіля В.П., Дубей І.Я // Ukrainica Bioorg. Acta. 2008. N 1. P. 3.
- [20] Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. М.: Химия, 1991. С. 368.
- [21] Прэч Э., Бюльманн Ф., Аффельтер К. Определение строения органических соединений. М.: Мир, 2006. С. 35.
- [22] Заикин В.Г., Варламов А.В., Микая А.И., Простаков Н.С. Основы масс-спектропии органических соединений. М.: МАИК «Наука»/Интерпериодика, 2001. С. 117.
- [23] Зефирюв Ю.В., Зоркий П.М. // Усп. хим. 1989. Т. 58. № 5. С. 713.
- [24] *Shishkin O.V., Omelchenko I.V., Kalyuzhny A.L., Paponov B.V.* // Struct. Chem. 2010. Vol. 21. N 5. P. 1005. DOI: 10.1007/s11224-010-9638-2.
- [25] *Sheldrick G.* // Acta Crystallogr. (A). 2008. N 64. P. 112. DOI: 10.1107/S0108767307043930.