

НОВЫЕ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИИ N'-ЗАМЕЩЕННЫХ N-(2,2-ДИХЛОР-1-ЦИАНОЭТЕНИЛ)МОЧЕВИН С АЛИФАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

© 2021 г. Ю. Е. Корний^а, С. А. Чумаченко^а, О. В. Шаблыкин^а,
Э. Б. Русанов^б, В. С. Броварец^{а,*}

^а Институт биоорганической химии и нефтехимии имени В. П. Кухаря Национальной академии наук Украины,
ул. Мурманская 1, Киев, 02094 Украина

^б Институт органической химии Национальной академии наук Украины, Киев, 02660 Украина
*e-mail: brovarets@bpci.kiev.ua

Поступило в Редакцию 20 апреля 2021 г.

После доработки 20 апреля 2021 г.

Принято к печати 6 мая 2021 г.

При взаимодействии замещенных 3,3-дихлорпроп-2-еннитрилов, содержащих во втором положении остаток N-метилмочевины или N,N-диметилмочевины, со вторичными алифатическими аминами образуются неизвестные ранее 2,5-ди(алкиламино)-1,3-оксазол-4-карбонитрилы. В случае взаимодействия N-(2,2-дихлор-1-цианоэтенил)-N'-метилмочевины с бензиламинами получены 4,5-ди(алкиламино)-1-метил-1*H*-имидазол-2(5*H*)-оны.

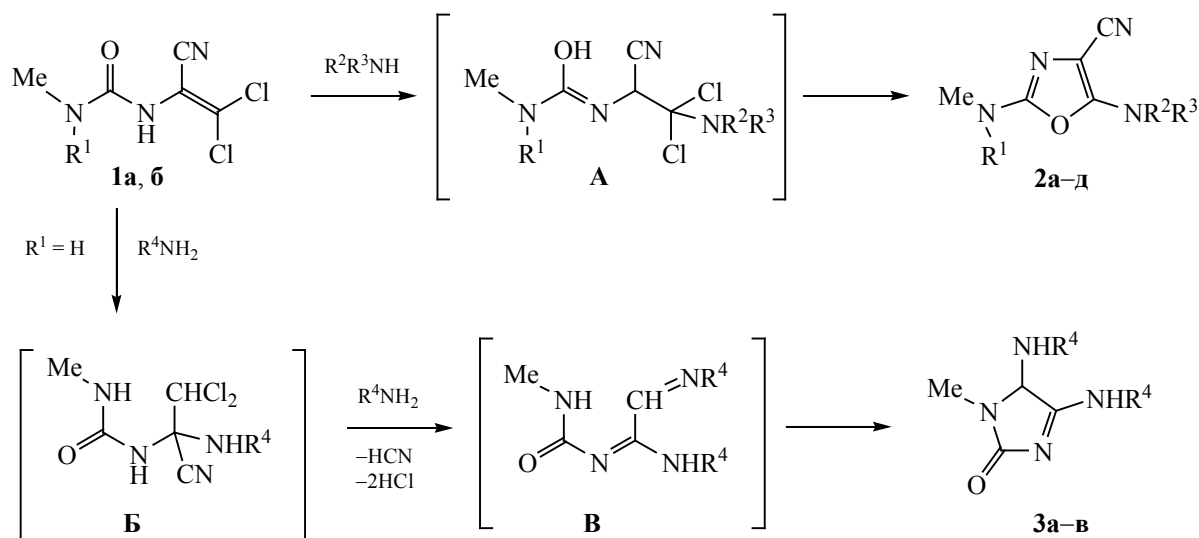
Ключевые слова: циклизация, N-(2,2-дихлор-1-цианоэтенил)-N'-метилмочевина, 2,5-ди(алкиламино)-1,3-оксазол-4-карбонитрил, 4,5-ди(алкиламино)-1-метил-1*H*-имидазол-2(5*H*)-он

DOI: 10.31857/S0044460X21060020

Ранее сообщалось о синтезе новых N-(2,2-дихлор-1-цианоэтенил)-N'-метил(фенил)-мочевин и их циклизациях под действием триэтиламина и алифатических аминов [1]. Как было показано, продуктами такого взаимодействия являются 4-(дихлорметилиден)-5-имино-1-метил(фенил)имидазолидин-2-оны – продукты внутримолекулярной циклизации мочевиного фрагмента на нитрильную группу, и аддукты с аминами – 4-(алкиламино)-4-(дихлорметил)-5-имино-1-метилимидазолидин-2-оны. Такое неожиданное протекание реакции и отсутствие целевых замещенных 2,5-диаминооксазолов заставило нас искать новые пути их синтеза. Так, анализируя состав реакционной смеси алифатических аминов и N-(2,2-дихлор-1-цианоэтенил)-N'-метилмочевины было замечено наличие небольших количеств желаемых оксазолов **2a–д**. По-видимому, реакция соединения **1** с аминами может протекать под термодинамическим и кинетическим контролем. Так,

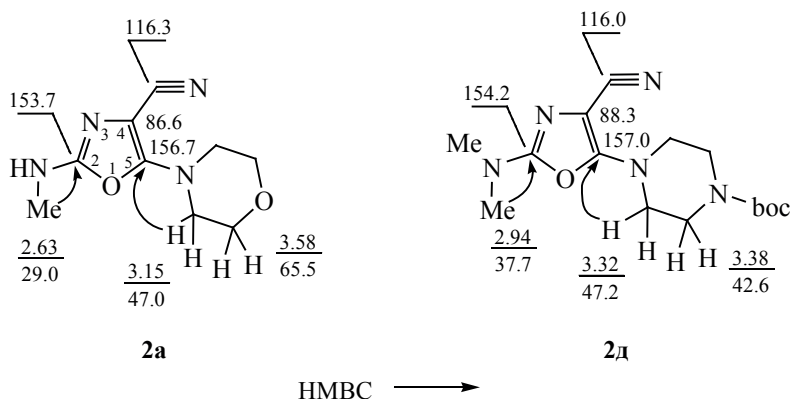
оказалось, что в классических условиях [2] при взаимодействии амина с 2-ациламино-3,3-дихлоракрилонитрилами при комнатной температуре образуется сложная смесь, из которой не удалось выделить соединения в индивидуальном состоянии. Однако прибавлением соединений **1** к кипящему раствору амина получены некоторые представители 2,5-диамино-1,3-оксазолов с удовлетворительными выходами (схема 1). Реакция N-(2,2-дихлор-1-цианоэтенил)-N'-метилмочевины **1a** с бензиламинами при таком обратном порядке прибавления в 2-пропанол приводит к образованию многокомпонентной смеси. Однако, если повысить температуру реакционной среды (кипение в диоксане), доминирующим является продукт конденсации с 2 экв. бензиламина. Для доказательства неожиданного образования 4,5-ди(алкиламино)-1-метил-1*H*-имидазол-2(5*H*)-онов **3** нами были получены кристаллы и проведено рентгеноструктурное исследование на примере соединения **3a**.

Схема 1.



$R^1 = H$ (**1a**, **2a**, **6**), Me (**16**, **2b-d**); $R^2R^3NH = 4\text{-MeN}(\text{CH}_2)_4\text{NH}$ (**2b**), $\text{O}(\text{CH}_2)_4\text{NH}$ (**2a**, **г**), 4-Boc- $\text{N}(\text{CH}_2)_4\text{NH}$ (**26**, **д**); $R^4NH_2 = \text{PhCH}_2\text{NH}_2$ (**3a**), 4-MeOC₆H₄CH₂NH₂ (**36**), 4-ClC₆H₄CH₂NH₂ (**3в**).

Схема 2.



Механизм образования соединений **3a-в** включает стадии присоединения остатка бензиламина с образованием промежуточных соединений **Б**, замещения нитрильной группы и двух атомов хлороводорода (**В**) с последующей циклизацией (схема 1).

Взаимодействие мочевины **1a, 6** с алифатическими аминами, по нашему мнению, не ограничивается только полученными результатами и является перспективным для дальнейших исследований.

Строение всех полученных соединений доказано спектральными методами. В спектрах ЯМР ¹³C исходного акрилонитрила **16** найдены сигнал карбонильной группы (153.1 м. д.) и сигналы в

области, характерной для нитрильной группы. В спектрах ЯМР ¹³C соединений **2a-d** также присутствуют сигналы нитрильной группы в области 116.0–117.1 м. д. Для исследования строения соединений **2a, д** был использован комплексный ЯМР анализ (HSQC, HMBC). Основные корреляции сигналов ¹H и ¹³C представлены на схеме 2. На образование 2,5-диаминооксазольного фрагмента в соединениях **2a, д** указывают корреляции в спектрах HMBC между атомами NCH₂ [3.15 (**а**), 3.32 (**д**) м. д.] и C⁵ [156.7 (**а**), 157.0 (**д**) м. д.], а также CH₃N [2.63 (**а**), 2.94 (**д**) м. д.] и C² [153.7 (**а**), 154.2 (**д**) м. д.].

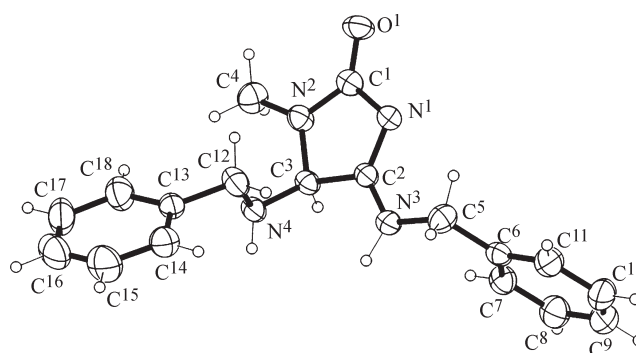
Для подтверждения пространственного строения 4,5-ди(алкиламино)-1-метил-1*H*-имидазол-2(5*H*)-онов **3а–в** нами был проведен рентгеноструктурный анализ одного из его представителей – соединения **3а**, общий вид молекулы которого и основные геометрические параметры показаны на рисунке.

В структуре соединения **3а** центральный цикл плоский, выход атомов из среднеквадратичной плоскости составляет 0.0270 Å, а фенильные кольца C⁶–C¹¹ и C¹³–C¹⁸ развернуты и образуют с ним двугранные углы 72.0(1) и 45.3(1)° соответственно. Распределение длин связей в гетероцикле свидетельствует о сопряжении в системе атомов N¹–N²–C¹–C², так как связи имеют промежуточное значение между одинарными и двойными (см. рисунок). Интересно отметить, что связи N¹–C² 1.348(3) и N³–C² 1.324(4) Å сильно сокращены по сравнению с значениями характерными для одинарной C–N связи (1.45 Å), а атомы азота N¹ и N³ в кристалле образуют между собой сокращенный межмолекулярный контакт 2.999(3) Å вследствие N³–H³ⁿ...N¹ водородной связи с параметрами: N³–H³ⁿ 0.96(2) Å, N³H³ⁿ...N¹ 175(2)°. Атом N³ имеет плоскотригональную, а атом N⁴ – пирамидальную конфигурацию связей. Соответствующие суммы валентных углов при этих атомах составляют 359.3(2) и 348(3)°.

Таким образом, на основе N'-замещенных N-(2,2-дихлор-1-цианоэтил)мочевин нами получены новые 2,5-ди(алкиламино)-1,3-оксазол-4-карбонитрилы, а также 4,5-ди(алкиламино)-1-метил-1*H*-имидазол-2(5*H*)-оны.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры зарегистрированы на спектрометре Vertex-70 в таблетках KBr. Спектры ЯМР ¹H и ¹³C получены на приборе Bruker AVANCE DRX-500 (500 и 125 МГц соответственно) в DMSO-*d*₆ или CDCl₃. Хромато-масс-спектры записаны при использовании жидкостной хромато-масс-спектрометрической системы на высокоскоростном жидкостном хроматографе Agilent 1100 Series, оснащенном диодной матрицей с масс-селективным детектором Agilent LC/MSD SL. Параметры хромато-масс-анализа: колонка Zorbax SB-C18 1.8 мкм 4.6×15 мм (PN 821975-932); растворитель: А – MeCN–H₂O, 95:5, 0.1%-ная CF₃COOH;



Общий вид молекулы соединения **3а** в кристалле. Основные длины связей и валентные углы: O¹–C¹ 1.252(3), N¹–C² 1.348(3), N¹–C¹ 1.430(3), N²–C¹ 1.393(3), N²–C³ 1.467(3), C²–C³ 1.553(3), N³–C² 1.324(3), N³–C⁵ 1.476(3), N⁴–C³ 1.465(3), N⁴–C¹² 1.473(3) Å; C²N¹C¹ 106.0(2), N²C¹N¹ 110.3(2), C¹N²C³ 111.3(2), N²C³C² 98.5(2), N¹C²C³ 113.5(2), C²N³C⁵ 124.0(2), C³N⁴C¹² 115.9(2)°.

Б – 0.1%-ная водная CF₃COOH; поток элюента 3 мл/мин, объем впрыскивания – 1 мкл, УФ детекторы – 215, 254, 285 нм, метод ионизации – химическая ионизация при атмосферном давлении (APCI), диапазон сканирования – *m/z* 80–1000. Элементный анализ проведен в Лаборатории аналитической химии Института биоорганической химии и нефтехимии им. В.П. Кухаря Национальной академии наук Украины. Содержание углерода и водорода определено весовым методом Прегля, азота – газометрическим микрометодом Дюма, хлора – титриметрическим методом Шёнигера [3]. Температуры плавления измеряли на приборе Fisher-Johns. Контроль за протеканием реакции и чистотой полученных соединений осуществляли методом тонкослойной хроматографии на пластинках Silufol UV-254 в системе хлороформ–метанол (10:0.2).

N-(2,2-Дихлор-1-цианоэтил)-N'-метилмочевина **1а** получена по описанной ранее методике [1].

N,N-Диметил-N'-(2,2-дихлор-1-цианоэтил)мочевина (**1б**) получена из N,N-диметил-N'-(2,2,2-трихлор-1-гидроксиэтил)мочевины по методике [1]. Выход 85%, т. пл. 164–166°C. ИК спектр, ν, см^{–1}: 1501, 1520, 1595, 1658, 2229 (CN), 3057–3378 (NH). Спектр ЯМР ¹H (DMSO-*d*₆), δ, м. д.: 2.87 с (6H, CH₃), 8.61 с (1H, NH). Спектр ЯМР ¹³C (DMSO-*d*₆), δ_C, м. д.: 34.4 (2CH₃), 111.5, 112.4, 130.6, 153.1 (C=O). Масс-спектр, *m/z*: 208 [M + H]⁺. Найдено, %: C 34.50; H 3.47; Cl 33.96; N 20.02.

$C_6H_7Cl_2N_3O$. Вычислено, %: С 34.64; Н 3.39; Cl 34.08; N 20.20.

N,N-Диметил-N'-(2,2,2-трихлор-1-гидрокси-этил)мочевина получена по описанной ранее методике [4]. Выход 82%, т. пл. 156–158°C (т. пл. 157°C [4]). ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1518, 1625 (C=O), 3035–3316 (NH + OH). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 2.83 с (6H, CH_3), 5.70 д (1H, CH, $^3J_{HH}$ 11.0 Гц), 6.60 д (1H, OH, $^3J_{HH}$ 11.0 Гц), 7.44 уш. с (1H, NH). Спектр ЯМР ^{13}C (ДМСО- d_6), δ_C , м. д.: 34.5 (2 CH_3), 82.3 (CH), 102.9 (CCl $_3$), 156.3 (C=O). Масс-спектр, m/z : 235 $[M + H]^+$. Найдено, %: С 25.71; Н 3.87; Cl 45.09; N 11.98. $C_5H_9Cl_3N_2O_2$. Вычислено, %: С 25.50; Н 3.85; Cl 45.16; N 11.90.

2,5-Ди(алкиламино)-1,3-оксазол-4-карбонитрилы (2а–д). К раствору 100 ммоль соответствующего амина в 40 мл пропан-2-ола при кипячении порциями при интенсивном перемешивании прибавляли 20 ммоль соединения **1а, б**. Смесь кипятили в течение 1 ч, затем охлаждали. Осадок отфильтровывали, промывали большим количеством воды и соединения **2а–д** очищали кристаллизацией из пропан-2-ола.

2-(Метиламино)-5-(морфолин-4-ил)-1,3-оксазол-4-карбонитрил (2а). Выход 37%, т. пл. 168°C (разл.). ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1519, 1604, 1681, 2210 (CN), 3005–3325 (NH). Спектр ЯМР ^1H (CDCl $_3$), δ , м. д.: 2.63 д (3H, CH_3 , $^3J_{HH}$ 5.0 Гц), 3.10–3.20 м (4H, CH_2), 3.53–3.62 м (4H, CH_2), 5.71 уш. с (1H, NH). Спектр ЯМР ^{13}C (CDCl $_3$), δ_C , м. д.: 29.0 (CH_3), 47.0 (CH_2 , морфолин), 65.5 (CH_2 , морфолин), 86.6 (C ^{4} , оксазол), 116.3 (CN), 153.7 (C ^{2} , оксазол), 156.7 (C ^{5} , оксазол). Масс-спектр, m/z : 209 $[M + H]^+$. Найдено, %: С 51.74; Н 5.87; N 27.05. $C_9H_{12}N_4O_2$. Вычислено, %: С 51.92; Н 5.81; N 26.91.

трет-Бутил-4-[4-циано-2-(метиламино)-1,3-оксазол-5-ил]пиперазин-1-карбоксилат (2б). Выход 61%, т. пл. 140°C (разл.). ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1534, 1600, 1696 (плечо), 2207 (CN), 3095–3385 (NH). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 1.39 с (9H, CH_3), 2.66 д (3H, CH_3 , $^3J_{HH}$ 4.5 Гц), 3.19–3.32 м (4H, CH_2), 3.40–3.52 м (4H, CH_2), 7.11 д (1H, NH, $^3J_{HH}$ 4.5 Гц). Спектр ЯМР ^{13}C (ДМСО- d_6), δ_C , м. д.: 28.4 (3 CH_3), 29.1 (CH_3), 42.3 (CH_2 , пиперазин), 47.0 (CH_2 , пиперазин), 79.8 [$C(CH_3)_3$], 86.1 (C ^{4} , оксазол), 117.0 (CN), 154.1, 154.2, 157.0 (C ^{5} , оксазол). Масс-спектр, m/z : 308 $[M + H]^+$. Найдено, %:

С 54.74; Н 6.70; N 22.96. $C_{14}H_{21}N_5O_3$. Вычислено, %: С 54.71; Н 6.89; N 22.79.

2-(Диметиламино)-5-(4-метилпиперазин-1-ил)-1,3-оксазол-4-карбонитрил (2в). Выход 37%, масло. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1450, 1589, 1672, 2206 (CN). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 2.19 с (3H, CH_3), 2.35–2.44 м (4H, CH_2), 2.86 с (6H, CH_3), 3.30–3.45 м (4H, CH_2). Спектр ЯМР ^{13}C (ДМСО- d_6), δ_C , м. д.: 37.8 (2 CH_3), 46.1 (CH_3), 46.9 (CH_2 , пиперазин), 53.7 (CH_2 , пиперазин), 85.8 (C ^{4} , оксазол), 117.1 (CN), 154.0 (C ^{2} , оксазол), 157.6 (C ^{5} , оксазол). Масс-спектр, m/z : 236 $[M + H]^+$. Найдено, %: С 56.28; Н 7.20; N 29.63. $C_{11}H_{17}N_5O$. Вычислено, %: С 56.15; Н 7.28; N 29.76.

2-(Диметиламино)-5-(морфолин-4-ил)-1,3-оксазол-4-карбонитрил (2г). Выход 46%, т. пл. 93–95°C. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1462, 1597, 1681, 2199 (CN). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м. д.: 2.86 с (6H, CH_3), 3.18–3.34 м (4H, CH_2), 3.60–3.75 м (4H, CH_2). Спектр ЯМР ^{13}C (ДМСО- d_6), δ_C , м. д.: 37.7 (2 CH_3), 47.1 (CH_2 , морфолин), 65.5 (CH_2 , морфолин), 86.1 (C ^{4} , оксазол), 116.9 (CN), 154.1 (C ^{2} , оксазол), 157.6 (C ^{5} , оксазол). Масс-спектр, m/z : 223 $[M + H]^+$. Найдено, %: С 54.17; Н 6.44; N 25.10. $C_{10}H_{14}N_4O_2$. Вычислено, %: С 54.04; Н 6.35; N 25.21.

трет-Бутил-4-[4-циано-2-(диметиламино)-1,3-оксазол-5-ил]пиперазин-1-карбоксилат (2д). Выход 51%, т. пл. 97–99°C. ИК спектр, ν , cm^{-1} : 1478, 1598, 1680, 1698, 2208 (CN). Спектр ЯМР ^1H (CDCl $_3$), δ , м. д.: 1.45 с (9H, CH_3), 2.94 с (6H, CH_3), 3.28–3.36 м (4H, CH_2), 3.34–3.42 м (4H, CH_2). Спектр ЯМР ^{13}C (CDCl $_3$), δ_C , м. д.: 28.3 (3 CH_3), 37.7 (2 CH_3), 42.6 (CH_2 , пиперазин), 47.2 (CH_2 , пиперазин), 80.4 [$C(CH_3)_3$], 88.3 (C ^{4} , оксазол), 116.0 (CN), 154.2 (C ^{2} , оксазол), 154.4 (C=O), 157.0 (C ^{5} , оксазол). Масс-спектр, m/z : 322 $[M + H]^+$. Найдено, %: С 55.89; Н 7.09; N 21.91. $C_{15}H_{23}N_5O_3$. Вычислено, %: С 56.06; Н 7.21; N 21.79.

4,5-Ди(алкиламино)-1-метил-1H-имидазол-2(5H)-оны (3а–в). К суспензии 20 ммоль соединения **1а** в 40 мл диоксана при интенсивном перемешивании прибавляли 100 ммоль соответствующего амина. Смесь кипятили в течение 1 ч, затем охлаждали. Растворитель удаляли в вакууме, остаток обрабатывали 30 мл воды и экстрагировали хлористым метиленом (3×30 мл). Экстракт промывали

вали водой (4×5 мл) и сушили Na₂SO₄, растворитель удаляли в вакууме. Полученные соединения **3а–в** очищали кристаллизацией из диоксана.

4,5-Ди(бензиламино)-1-метил-1H-имидазол-2(5H)-он (3а). Выход 41%, т. пл. 151–153°C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 1497, 1597, 1624, 1703 (C=O), 3029–3345 (NH). Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 2.70 с (3H, CH₃), 3.17–3.21 м (1H, CH₂), 3.35–3.40 м (1H, CH₂), 3.53–3.58 м (1H, NH), 4.37–4.54 м (2H, CH₂), 4.91 д (1H, CH, ³J_{NH} 5.0 Гц), 7.20–7.37 м (10H, H_{Ar}), 8.57 т (1H, NH, ³J_{NH} 5.5 Гц). Спектр ЯМР ¹³C (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 26.9 (CH₃), 45.3 (CH₂), 45.5 (CH₂), 74.3 (CH), 127.1, 127.5, 128.0, 128.5, 128.6, 128.7, 139.0, 140.4, 167.5, 176.4. Масс-спектр, m/z : 309 [M + H]⁺. Найдено, %: C 70.28; H 6.61; N 18.02. C₁₈H₂₀N₄O. Вычислено, %: C 70.11; H 6.54; N 18.17.

4,5-Ди(4-метоксибензиламино)-1-метил-1H-имидазол-2(5H)-он (3б). Выход 63%, т. пл. 155–157°C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 1462, 1513, 1584, 1612, 1633, 1710 (C=O), 3060–3375 (NH). Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 2.70 с (3H, CH₃), 3.05–3.11 м (1H, CH₂), 3.26–3.32 м (1H, CH₂), 3.39–3.43 м (1H, NH), 3.70 с (6H, CH₃), 4.30–4.47 м (2H, CH₂), 4.91 д (1H, CH, ³J_{NH} 4.5 Гц), 6.80–6.92 м (4H, H_{Ar}), 7.16 д (2H, H_{Ar}, ³J_{NH} 8.0 Гц), 7.24 д (2H, H_{Ar}, ³J_{NH} 8.5 Гц), 8.49 т (1H, NH, ³J_{NH} 5.5 Гц). Спектр ЯМР ¹³C (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 26.9 (CH₃), 44.6 (CH₂), 45.0 (CH₂), 55.4 (CH₃O), 55.5 (CH₃O), 74.2 (CH), 113.8, 114.2, 129.4, 129.7, 130.9, 132.3, 158.5, 158.8, 167.5, 176.2. Масс-спектр, m/z : 369 [M + H]⁺. Найдено, %: C 65.15; H 6.70; N 15.35. C₂₀H₂₄N₄O₃. Вычислено, %: C 65.20; H 6.57; N 15.21.

4,5-Ди(4-хлорбензиламино)-1-метил-1H-имидазол-2(5H)-он (3в). Выход 53%, т. пл. 147–149°C. ИК спектр, ν , см⁻¹: 1490, 1623, 1704 (C=O), 3027–3319 (NH). Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 2.69 с (3H, CH₃), 3.12–3.18 м (1H, CH₂), 3.36–3.43 м (1H, CH₂), 3.66–3.69 м (1H, NH), 4.37–4.45 м (2H, CH₂), 4.92 уш. с (1H, CH), 7.26–7.40 м (8H, H_{Ar}), 8.61 уш. с (1H, NH). Спектр ЯМР ¹³C (ДМСО-*d*₆), δ , м. д.: 27.0 (CH₃), 44.6 (CH₂), 44.8 (CH₂), 74.2 (CH), 128.3, 128.6, 129.8, 130.3, 131.6, 132.0, 138.0, 139.5, 167.3, 176.3. Масс-спектр, m/z : 377 [M + H]⁺. Найдено, %: C 57.48; H 4.77; Cl 18.82; N 14.97. C₁₈H₁₈Cl₂N₄O. Вычислено, %: C 57.31; H 4.81; Cl 18.79; N 14.85.

Рентгеноструктурное исследование моно-кристалла соединения 3а (0.07 × 0.20 × 0.43 мм) проведено при комнатной температуре на дифрактометре Bruker Smart Apex II (MoK α -излучение, графитовый монохроматор, $\theta_{\max}$ 25°, сегмент сферы $-16 \leq h \leq 17$, $-15 \leq k \leq 15$, $-11 \leq l \leq 11$). Всего было собрано 13097 отражений, из которых 2856 являются независимыми (*R*-фактор усреднения 0.1172). Была введена коррекция поглощения по программе SADABS методом мультисканирования (отношение $T_{\min}/T_{\max} = 0.6356/0.9940$). Кристаллы соединения **3а** моноклинные, пространственная группа *P*2₁/*c*, *a* 14.468(10), *b* 12.971(11), *c* 9.326(7) Å, β 90.12(4)°, *V* 1750(2) Å³, *Z* 4, $d_{\text{выч}}$ 1.166, μ 0.075 мм⁻¹, *F*(000) 652. Структура расшифрована прямым методом и уточнена методом наименьших квадратов в полноматричном анизотропном приближении с использованием комплекса программ Bruker SHELXTL [5]. Все СН-атомы водорода посажены геометрически и уточнены по модели *наездника*. Окончательные значения факторов расходимости: *R*₁(*F*) 0.0485, *wR*₂(*F*²) 0.0739 по 1064 отражений с *I* > 2σ(*I*), *R*₁(*F*) 0.1628, *wR*₂(*F*²) 0.0885, GOF 0.814 по всем независимым отражениям, 218 уточняемых параметров. Остаточная электронная плотность из разностного ряда Фурье после последнего цикла уточнения 0.12 и –0.13 е/Å³. Данные РСА депонированы в Кембриджскую базу кристаллоструктурных данных (CCDC 2076261).

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Корний Юрий Евгеньевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4266-8773>

Чумаченко Светлана Анатольевна, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7020-8622>

Шаблыкин Олег Валентинович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6810-9860>

Русанов Эдуард Борисович, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7678-0985>

Броварец Владимир Сергеевич, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6668-3412>

ФОНДОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при финансовой поддержке Национального фонда исследований Украины (проект № 2020.01/0075).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Чумаченко С.А., Качаева М.В., Шаблыкин О.В., Русанов Э.Б., Броварец В.С. // ЖОХ. 2017. Т. 87. Вып. 5. С. 795; Chumachenko S.A., Kachaeva M.V., Shablykin O.V., Rusanov E.B., Brovarets V.S. // Russ. J. Gen. Chem. 2017. Vol. 87. N 5. P. 985. doi 10.1134/S1070363217050164
2. Драч Б.С., Свиридов Э.П., Кисиленко А.А., Курсанов А.В. // ЖОХ. 1973. Т. 9. Вып. 9. С. 1818.
3. Климова В.А. Основные микрометоды анализа органических соединений. М.: Химия, 1975.
4. Chattaway F.D., James E.J.F. // J. Chem. Soc. 1934. P. 109. doi 10.1039/JR9340000109
5. Sheldrick G.M. // Acta Crystallogr. (A). 2008. Vol. 64. P. 112. doi 10.1107/S0108767307043930

New Heterocyclization Reactions of *N'*-Substituted *N*-(2,2-Dichloro-1-cyanoethenyl)ureas with Aliphatic Amines

Yu. E. Kornii^a, S. A. Chumachenko^a, O. V. Shablykin^a, E. B. Rusanov^b, and V. S. Brovarets^{a,*}

^a V.P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry,
National Academy of Science of Ukraine, Kyiv, 02094 Ukraine

^b Institute of Organic Chemistry, National Academy of Science of Ukraine, Kyiv, 02660 Ukraine

*e-mail: brovarets@bpci.kiev.ua

Received April 20, 2021; revised April 20, 2021; accepted May 6, 2021

The reaction of substituted 3,3-dichloroprop-2-enenitriles containing an *N*-methylurea or *N,N*-dimethylurea residue in the second position with secondary aliphatic amines gives rise to previously unknown 2,5-bis(alkylamino)-1,3-oxazole-4-carbonitriles. In the case of the reaction of *N*-(2,2-dichloro-1-cyanoethenyl)-*N'*-methylureas with benzylamines, 4,5-bis(alkylamino)-1-methyl-1*H*-imidazol-2(5*H*)-ones were obtained.

Keywords: cyclization, *N*-(2,2-dichloro-1-cyanoethenyl)-*N'*-methylurea, 2,5-bis(alkylamino)-1,3-oxazole-4-carbonitrile, 4,5-bis(alkylamino)-1-methyl-1*H*-imidazol-2(5*H*)-one