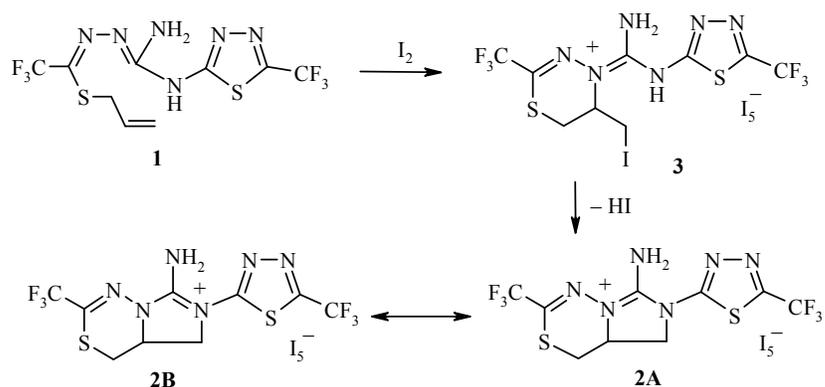


## ТАНДЕМНАЯ ГЕТЕРОЦИКЛИЗАЦИЯ В СИНТЕЗЕ НОВОГО ПРОИЗВОДНОГО ИМИДАЗО[1,5-*d*][1,3,4]ТИАДИАЗИНА

**Ключевые слова:** 2-(5-аллилтио-2-амино-6,6,6-трифтор-1,3,4-триаза-2,4-гекса-диен-1-ил)-5-трифторметил-1,3,4-тиадиазол, пентаиодид 7-амино-2-трифторметил-6-(5-трифторметил-1,3,4-тиадиазол-2-ил)-4,4а,5,6-тетрагидроимидазо[1,5-*d*][1,3,4]-тиадиазиния.

Имидазо[1,5-*d*][1,3,4]тиадиазины являются малоизученными системами. Известен синтез соединений данного ряда реакцией иминофосфоранов с изотиоцианатами [1].

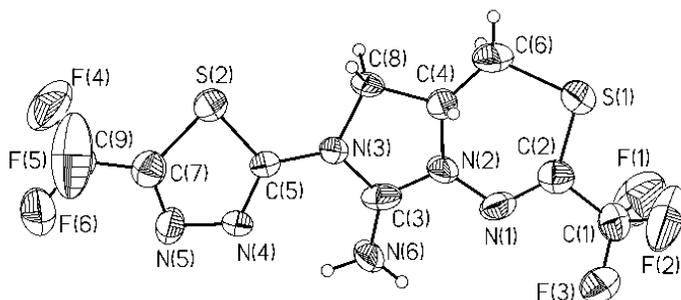
Нами установлено, что реакция 2-(5-аллилтио-2-амино-6,6,6-трифтор-1,3,4-триаза-2,4-гексадиен-1-ил)-5-трифторметил-1,3,4-тиадиазола (**1**) с иодом сопровождается тандемным замыканием двух гетероциклических систем и образованием пентаиодида 7-амино-2-трифторметил-6-(5-трифторметил-1,3,4-тиадиазол-2-ил)-4,4а,5,6-тетрагидроимидазо[1,5-*d*][1,3,4]тиадиазиния (**2**). По-видимому, реакция протекает через промежуточный тиадиазин **3**.



Структура соединения **2** подтверждена данными ЯМР  $^1\text{H}$  и РСА. В спектре ЯМР  $^1\text{H}$  соединения **2** один из сигналов протонов группы  $\text{NCH}_2$  находится в более слабом поле, чем сигнал протона  $-\text{NCH}-$  (**Н-9а**), что, по-видимому, обусловлено большим вкладом резонансной структуры **2В**. Общий вид структуры катиона, по данным РСА, представлен на рисунке.

Спектры ЯМР  $^1\text{H}$  записаны на спектрометре Bruker DRX-400 (400 МГц) в  $\text{DMSO-}d_6$ , внутренний стандарт ТМС. Рентгеноструктурный анализ соединения **2** проведен для обломка призматического темнокоричневого кристалла размером  $0.28 \times 0.18 \times 0.11$  мм при 295(2) К. Брутто-формула соединения  $\text{C}_9\text{H}_7\text{F}_6\text{I}_5\text{N}_6\text{S}_2$ , кристаллы триклинные,  $a = 9.3080(2)$ ,  $b = 10.9851(18)$ ,  $c = 11.9850(2)$  Å,  $\alpha = 103.861(16)^\circ$ ,  $\beta = 94.305(17)^\circ$ ,  $\gamma = 91.590(15)^\circ$ , пр. гр. *P*-1. РСА проведен на автоматическом четырехкружном дифрактометре Xcalibur 3, структура решена и уточнена с использованием пакета программ SHELX [2]. Полные данные РСА зарегистрированы в Кембриджском банке структурных данных (депонент CCDC 787102) и могут быть запрошены по адресу [www.ccdc.cam.ac.uk/data\\_request/cif](http://www.ccdc.cam.ac.uk/data_request/cif), или предоставлены по запросу авторами.

Соединение **1** получено по методу [3].



Общий вид молекулы соединения **2**, по результатам РСА

Пентаиодид

7-амино-2-трифторметил-6-(5-трифторметил-1,3,4-тиадиазол-2-ил)-4,4а,5,6-

**тетрагидроимидазо[1,5-*d*][1,3,4]тиадиазиния (2).** К раствору 0.203 г (0.8 ммоль) измельченного иода в 3 мл уксусной кислоты добавляют раствор 0.076 г (0.2 ммоль) 2-(2-амино-5-аллилтио-6,6,6-трифтор-1,3,4-триаза-2,4-гекса-диен-1-ил)-5-трифторметил-1,3,4-тиадиазола (**1**) в 3 мл уксусной кислоты. Через 10 сут отфильтровывают черные кристаллы пентаиодида **2**. Выход 0.046 г (23 %), т. пл. 122 °С. Спектр ЯМР <sup>1</sup>H, δ, м. д. (*J*, Гц): 3.41 (1H, д. д, *J* = 9.57, *J* = 12.10, SCH<sub>2</sub>); 3.82 (1H, д. д, *J* = 2.86, *J* = 12.12, SCH<sub>2</sub>); 4.04 (1H, т, *J* = 8.59, NCH<sub>2</sub>); 4.40 (1H, м, NCH); 4.63 (1H, т, *J* = 8.63, NCH<sub>2</sub>); 6.18 (2H, уш. с, NH<sub>2</sub>). Найдено, %: С 10.34; Н 0.67; N 8.01; S 6.13. С<sub>9</sub>Н<sub>7</sub>Ф<sub>6</sub>И<sub>5</sub>Ν<sub>6</sub>С<sub>2</sub>. Вычислено, %: С 10.68; Н 0.70; N 8.31; S 6.34.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Molina, A. Arques, Ma. A. Alias, A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, *Tetrahedron*, **46**, 4353 (1990).
2. G. M. Sheldrick, *Acta Crystallogr.*, **A64**, 112 (2008).
3. Д. Г. Ким, Е. С. Ильиных, *ХГС*, 1425 (2010). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **46**, 1154 (2010)].

**Д. Г. Ким,\* Е. С. Ильиных, П. А. Слепухин<sup>а</sup>**

Южно-Уральский государственный университет,  
Челябинск 454080, Россия  
e-mail: [kim\\_dg48@mail.ru](mailto:kim_dg48@mail.ru)

Поступило 12.05.2010  
После доработки 10.08.2010

<sup>а</sup>Институт органического синтеза  
им. И. Я. Постовского УрО РАН,  
Екатеринбург 620990, Россия

ХГС. – 2010. – № 11. – С. 1742