

UOT 547.853.3

6-(4-METOKSİFENİL)-4-FENİL-1,2-DİHİDROPIRİMİDİN-2-ONUN SİNTEZİ VƏ QURULUŞU

N.C.Ramazanzadə, A.M.Məhərrəmov, Ə.N.Quliyev, M.M.Qurbanova

Bakı Dövlət Universiteti

E-mail: necef.ramazanzade17@gmail.com

Açar sözlər: multikomponent kondensləşmə reaksiyalar, 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-on, rentgen quruluş analizi (RQA)

Xülasə. İlk dəfə olaraq CF_3COOH iştirakında 4-metoksibenzaldehyd, aseto-fenon və karbamidin üçkomponentli kondensləşmə reaksiyası tədqiq edilmiş və nəticədə 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-on sintez olunmuşdur. Sintez olunan birləşmənin quruluşu rentgen quruluş analizi (RQA) metodu ilə təsdiq edilmişdir.

Giriş

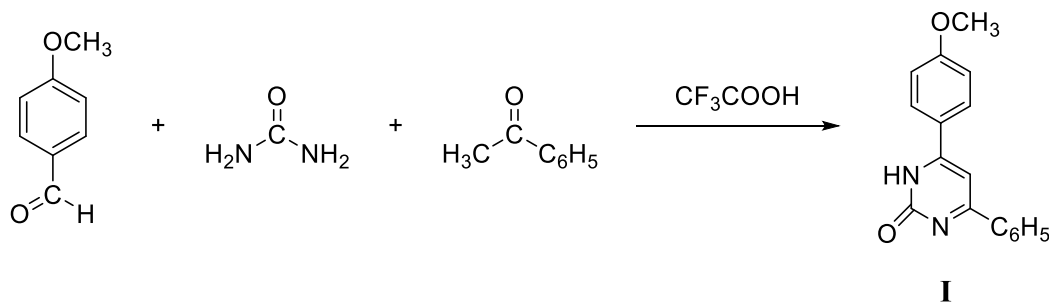
Son zamanlar üzvi sintezdə multikomponent kondensləşmə reaksiyaları tədqiqatçılar qarşısında geniş imkanlar açır. Çoxkomponentli domino reaksiyalar ekoloji və üzvi sintez sahəsində faydalı üsula çevrilmişdir, bu da onların yaşıl kimya tələblərinə uyğun olması ilə əlaqədardır. Məlumdur ki, Biginelli reaksiyası əsasında alifatik və aromatik sıra aldehidlərin karbamid(tiokarbamid) və metilenaktiv birləşmələrlə müxtəlif katalizatorlar iştirakında üçkomponentli birmərhələli kondensləşməsin-dən 3,4-dihidropirimidin-2(1H)-on(tionlar) sintez edilir və bu birləşmələr tibbdə geniş tətbiq sahələ-rinə malikdirlər [1-3].

Bu birləşmələrin tibbdə uğurla tətbiq olunmasını nəzərə alaraq, bizim tərəfimizdən müxtəlif aromatik aldehidlərin aseto-fenon və karbamidlə multikomponent kondensləşmə reaksiyaları HCl iştirakında tədqiq edilmişdir. Reaksiya məhsulları kondensləşmiş 4,5-bis-aril-8a-fenil-3,4,4a,5,6,8a – heksahidro 1H,8H-primido[4,5-d]pirimidin-2,7-dionlar olmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, reagentlə-rin 1:1:4 nisbətində daha çox çıxım əldə etmək olur[4].

Tədqiqat işləri davam etdirilərək bizim tərəfimizdən aromatik aldehid olaraq 4-metoksibenzal-dehid, aseto-fenon və karbamidin ilk dəfə olaraq güclü üzvi turşu olan CF_3COOH iştirakında üçkom-ponentli kondensləşməsi aparılmışdır. Müəyyən edilmişdir ki, bu zaman reaksiya məhsulu yüksək çıxımla 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-on (I) olmuşdur.

Nəticələrin müzakirəsi

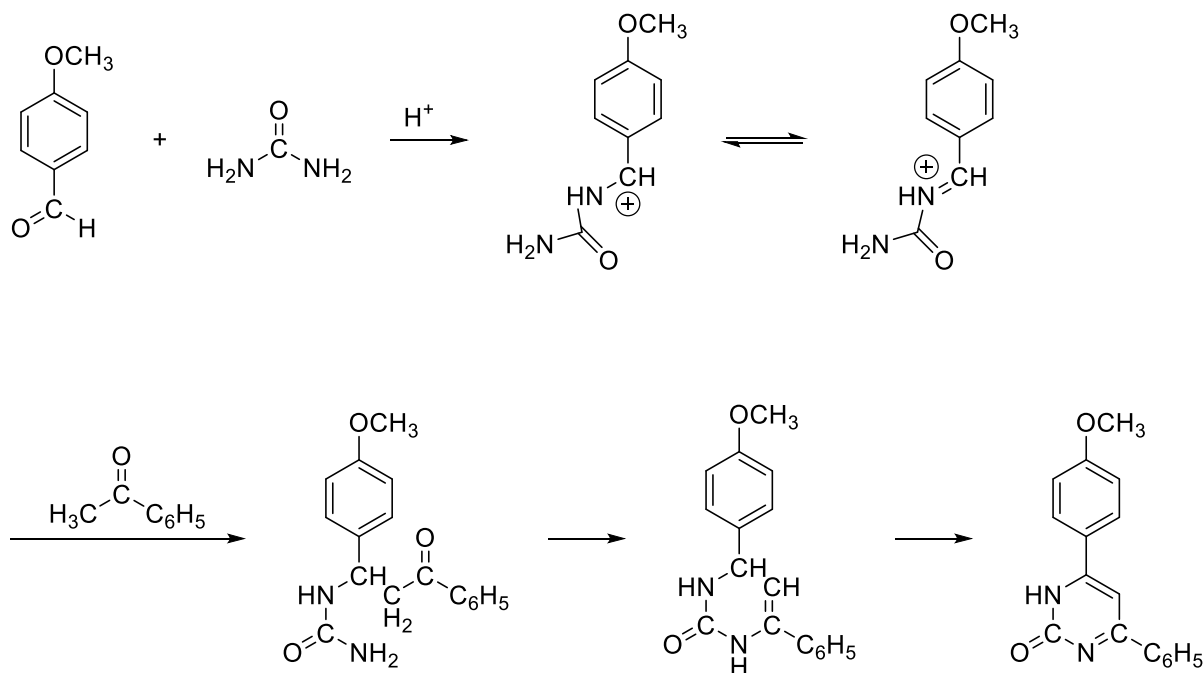
Təqdim olunan işdə ilk dəfə olaraq CF_3COOH iştirakında 4-metoksibenzaldehyd, aseto-fenon və karbamidin üçkomponentli kondensləşmə reaksiyası tədqiq edilmiş və nəticədə 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-on sintez olunmuşdur:



Sxem 1. 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-onun(I) sintezi

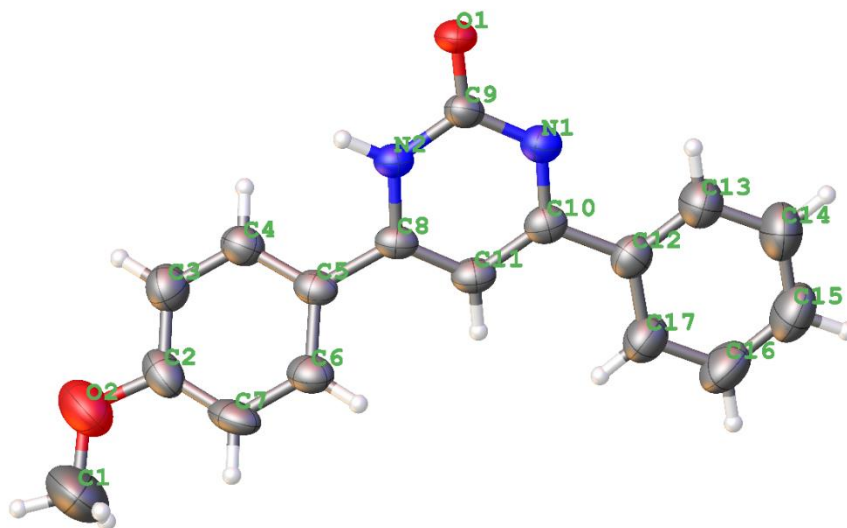
Reaksiyanın gedişinə və alınan birləşmənin təmizliyinə nazik təbəqəli xromatoqrafiya (NTX) metodu *Sorbfil* ilə nəzarət olunmuşdur.

Ehtimal olunan mexanizm aşağıdakı kimidir:



Sxem 2. 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-onun(I) sintezinin ehtimal olunan mexanizmi

Sintez olunan birləşmənin quruluşu roentgen quruluş analizi metodu (RQA) ilə təsdiq edilmişdir. Rentgen quruluş analizinin nəticələri Kembric Kristalloqrafiya Mərkəzləşmiş bazasında (Cambridge Crystallographic Data Center) (CCDC 2171833) yerləşdirilmişdir (şəkil 1).



Şəkil 1. 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-onun(I) molekulyar quruluşu

RQA metodu ilə quruluşu təsdiq olunan 6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-onun(I) əsas parametrləri cədvəl 1-də əks olunmuşdur.

Cədvəl 1

6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-onun(I)
əsas həndəsi parametrləri

Parametrlər	Birləşmə
	I
Empirical formula	C ₁₇ H ₁₄ N ₂ O ₂
<i>M</i>	278.30
Temperatur, K	296
Kristalın ölçüləri, mm ³	0.10 × 0.06 × 0.75
Kristalın quruluşu	Monoklinik
Xüsusi qruplar	P b c a
<i>a</i> , Å	7.3284(5)
<i>b</i> , Å	13.4574(10)
<i>c</i> , Å	28.058(2)
β, deg	90
<i>V</i> , Å ³	2767.1(4)
<i>Z</i>	8
ρ _{calcd} , g/cm ³	1.336
μ, mm ⁻¹	0.089
<i>F</i> (000)	1168.0
<i>N</i> _{ref}	2445
<i>h</i> , <i>k</i> , <i>l</i> _{max}	8,16,33
<i>S</i>	1.100
<i>N</i> _{par}	195
Data completeness	0.998
<i>R</i> (reflections)	0.0848(1838)
<i>wR</i> ₂ (reflections)	0.2560(2445)
Theta(max)	25.049
Residual electron density, e Å ⁻³	0.61

Təcrübi hissə

6-(4-metoksifenil)-4-fenil-1,2-dihidropirimidin-2-onun(I) sintez metodikası: İkiboğazlı kolbaya 0.5ml CF₃COOH iştirakında 15mmol karbamidin 7ml etanolda məhluluna 5mmol 4-metoksi-benzaldehyd əlavə edilir, qarışdırılır və otaq temperaturunda 24 saat saxlanılır. Həcmli çöküntü əmələ gəlir. Reaksiya qarışığına 5mmol asetofenon əlavə edilərək 3 saat qızdırılır. Reaksiya qarışığı soyududan sonra üzərinə 5mmol karbamid əlavə edilir və yenidən 3 saat qızdırılır. Təcrübənin sonunda çöküntü əmələ gəlir. Alınan çöküntü süzülür, yuyulur və etil spirtində C₂H₅OH yenidən kristallaşma metodu ilə təmizlənir. IQ (KBr, ν, sm⁻¹): 3270, 3099, 1611, 1512, 821. Çıxım 75 %. T_{ər}=242-245⁰C.

ƏDƏBİYYAT

1. Kaur, R.; Chaudhary, S.; Kumar, K.; Gupta, M.K.; Rawal, R.K. Recent synthetic and medicinal perspectives of dihydropyrimidinones: A review. Eur. J. Med. Chem. 2017, 132, 108–134
2. Liu, Y.; Liu, J.; Zhang, R.; Guo, Y.; Wang, H.; Meng, Q.; Sun, Y.; Liu, Z. Synthesis, Characterization, and Anticancer Activities Evaluation of Compounds Derived from 3,4-Dihydropyrimidin-2(1H)-one. Molecules 2019, 24, 891
3. Fatima, A.; Braga, T.C.; Neto, L.S.; Terra, B.S.; Oliveira, B.G.F.; da Silva, D.L.; Modolo, L.V. A mini-review on Biginelli adducts with notable pharmacological properties. J. Adv. Res. 2015, 6, 363–373
4. N.C.Ramazanadə, Ə.N.Quliyev, A.M.Məhərrəmov, M.M.Qurbanova. 4,5-Bis-aril-8a-fenil-3,4,4a,5,6,8a-hexahidro-1H,8H-pirimido[4,5-d]pirimidin-2,7-dionların sintezi. Heydər Əliyevin 99-cu ildönümünə həsr olunmuş doktorant, magistr və gənc tədqiqatçıların “Kimya və kimya texnologiyası” Respublika Elmi Konfransının materialları Bakı 2022 s.342

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE 6-(4-METHOXYPHENYL)-4-PHENYL-1,2-DIHYDROPYRIMIDIN-2-ONE**N.C.Ramazanzade, A.M.Maharramov, A.N.Kuliyev, M.M.Kurbanova***Baku State University**E-mail: necef.ramazanzade17@gmail.com*

Abstract. The three-component condensation reaction of 4-methoxybenzaldehyde with acetophenone and urea in the presence of CF_3COOH was investigated and as a result, 6-(4-methoxyphenyl)-4-phenyl-1,2-dihydropyrimidine-2-one was synthesized. The structure of the synthesized compound was confirmed by the X-ray method.

Keywords: *multicomponent condensation, 6-(4-methoxyphenyl)-4-phenyl-1,2-dihydropyrimidin-2-one, X-ray analysis*

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА 6-(4-МЕТОКСИФЕНИЛ)-4-ФЕНИЛ-1,2-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНА**Н.Дж.Рамазанзаде, А.М.Магеррамов, А.Н.Кулиев, М.М.Курбанова***Бакинский государственный университет**E-mail: necef.ramazanzade17@gmail.com*

Резюме. Впервые нами исследована трехкомпонентная конденсация 4-метоксибензальдегида, ацетофенона и карбамида в присутствии CF_3COOH . В результате проведенных исследований был синтезирован 6-(4-метоксифенил)-4-фенил-1,2-дигидропиримидин-2-он. Структура синтезированного соединения было доказано методом рентгенструктурного анализа РСА.

Ключевые слова: *мульткомпонентная конденсация, 6-(4-метоксифенил)-4-фенил-1,2-дигидропиримидин-2-он, рентгенструктурный анализ РСА*