# ГАЛОГЕНОГЕТЕРОЦИКЛІЗАЦІЯ МЕТИЛ 1-ПЕНТІНІЛПІРАЗОЛ-4-КАРБОКСИЛАТУ

*Повідайчик М. В.*, Онисько М. Ю.
Ужгородський національний університет, Ужгород, Україна
mariannapovidajchyk@gmail.com

Конденсовані піразолодіазини проявляють високу біологічну активність. Серед них важливе значення мають піразолопіримідини як аналоги природніх імідазолопіримідинів, так і піразолопіридазини. Синтез таких біциклічних систем на основі піразолу ефективно здійснюється методом електрофільної гетероциклізації ненасичених N- чи C-алкілненасичених похідних функціоналізованого піразолу. Тому дослідження регіохімії гетероциклізації алкінільних похідних піразолу є актуальним.

Метою запропонованої роботи є встановлення напрямку галогеноциклізації метил 1-пентінілпіразол-4-карбоксилату **2**, отриманого алкілуванням естеру 1 термінальним пентінілметансульфатом при нагріванні. Галоциклізацію метил N-пентінілпіразол-4-карбоксилату проводили в середовищі оцтової кислоти під дією еквімолярної кількості молекулярного чи гібридного галогену. Як гібридні галогени використовували індивідуальний бромід йоду і отриманий *in situ* в оцтовій кислоті з брому та йоду, а також хлорид йоду В результаті галогено-індукованої гетероциклізації отримано галогеніди 5-галогенометиліден-2-карбоксиметил-5,6,7,8-тетрагідропіразоло[1,2-a]піридазинію **3**–**6**. Слід відмітити, що природа циклізуючого реагенту не впливає на напрямок циклізації, а тільки на виходи солей. Найкращі виходи спостерігалися при циклізації бромідом йоду *in situ* (89 %) та індивідуальним бромідом йоду (69 %), які утворювали бромід 5-йодометиліден-2-карбоксиметил-5,6,7,8-тетрагідропіразоло[1,2-a]піридазинію **4**.

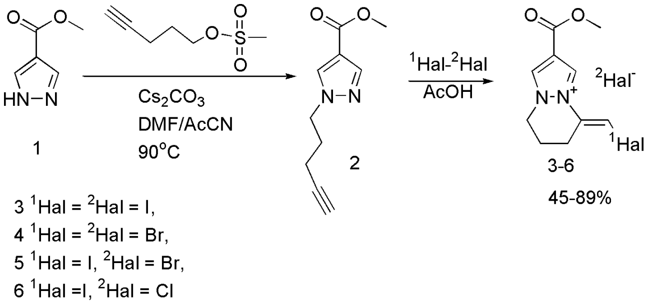


Рис. 1. Синтез та гетероциклізація метил 1-пентінілпіразол-4-карбоксилату **2**

Спектральні дані свідчать про проходження саме бромоіндукованої циклізації у випадку броміду **4** та йодоіндукованої циклізації для йодиду **3**, броміду **5** та хлориду **6**, а саме сигнал карбону в ЯМР $^{13}$C бромометиліденової групи у броміді **4** проявляється при 117 м.ч., а йодометиліденової групи у галогенідах **3, 5, 6** при 79–80 м.ч. Слід також відзначити, що у всіх випадках галоциклізації процес є стереоселективний з утворенням одного конфігураційного ізомеру.