

УДК 547.859

СИНТЕЗ (7-АРИЛ-5-МЕТИЛ-4,7-ДИГИДРОТЕТРАЗОЛО[1,5-*a*]ПИРИМИДИН-6-ИЛ)(ФЕНИЛ)МЕТАНОНОВ

© 2020 г. В. Л. Гейн^{a,*}, А. Н. Прудникова^a, А. А. Курбатова^a, М. В. Дмитриев^b

^a ФГБОУ ВО «Пермская государственная фармацевтическая академия»,
614990, Россия, г. Пермь, ул. Полевая 2
*e-mail: geinvl48@mail.ru

^b ФГБОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет»,
614990, Россия, г. Пермь, ул. Букирева 15

Поступила в редакцию 17 сентября 2019 г.
После доработки 16 января 2020 г.
Принята к публикации 17 января 2020 г.

Трехкомпонентная реакция 1-фенил-1,3-бутандиона с ароматическими альдегидами и 5-аминотетразола моногидратом протекает при выдерживании смеси исходных реагентов в отсутствие растворителя и катализатора при температуре 160–170°C в течение 15–20 мин с образованием (7-арил-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил)(фенил)метанонов.

Ключевые слова: мультикомпонентные реакции, реакция Биджинелли, 1-фенил-1,3-бутандион, 5-амино-тетразол, 4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин.

DOI: 10.31857/S0514749220030064

Среди различных классов органических соединений пиримидин и его производные представляют особый практический интерес в области синтеза биологически активных соединений. Известно, что пиримидиновое кольцо входит в состав таких важнейших для жизнедеятельности организма соединений как азотистые основания и витамины. В структуре молекул лекарственных средств пиримидиновый фрагмент встречается относительно часто [1]. Согласно литературным данным производные дигидропиримидин-2-она и его N,S-аналоги обладают широким спектром биологической активности [2]. За счет способности образовывать в организме прочные фермент-субстратные комплексы наиболее перспективными являются триазоло- и тетразоло[1,5-*a*]пиримидины, среди которых обнаружены вещества с противоопухолевой [3], противовирусной [4, 5], противомикробной [6], гипогликемической [7], жаропонижающей [8] и антиоксидантной [9] активностями.

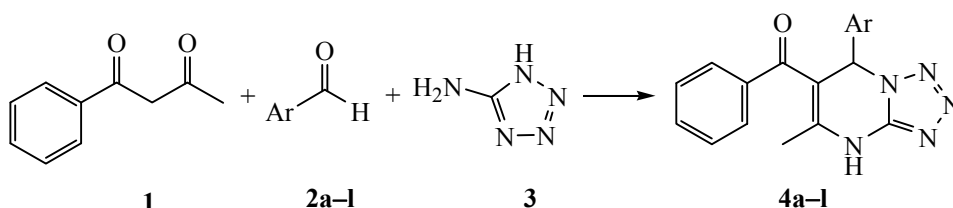
Наиболее распространенным методом получения сопряженных азотсодержащих гетероциклических соединений на данный момент являются

мультикомпонентные реакции [10]. Так, для синтеза замещенных 4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидинов широко используют трехкомпонентную реакцию Биджинелли, применяя в качестве амино-компоненты 5-аминотетразол [11–15].

В предыдущих работах, посвященных синтезу производных 4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидина методом сплавления исходных реагентов, в качестве β-дикарбонильной компоненты использовались эфиры, амиды ароил(гетерил)пировиноградной и ацетоуксусной кислот, а также метиловый эфир циннамоилпировиноградной кислоты [16]. С целью дальнейшего расширения ряда соединений данного класса нами был использован в качестве β-дикарбонильного соединения 1-фенил-1,3-бутандион.

В результате проведенных исследований было установлено, что при выдерживании смеси 1-фенил-1,3-бутандиона, ароматического альдегида и 5-аминотетразола моногидрата в эквимольных количествах в отсутствие растворителя и катализатора при температуре 160–170°C в течение 15–20 мин реакция протекает с образованием в качестве

Схема 1.



Ar = C₆H₅ (**a**), 4-(CH₃)₃CC₆H₄ (**b**), 3-CH₃OC₆H₄ (**c**), 4-C₂H₅OC₆H₄ (**d**), 2,5-(CH₃O)₂C₆H₃ (**e**), 3,4-(CH₃O)₂C₆H₃ (**f**), 4-(CH₃)₂NC₆H₄ (**g**), 3-BrC₆H₄ (**h**), 4-BrC₆H₄ (**i**), 2-ClC₆H₄ (**j**), 4-ClC₆H₄ (**k**), 4-NO₂C₆H₄ (**l**).

единственного продукта (7-арил-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил)(фенил)метанонов **4a-l** (схема 1).

Синтезированные соединения **4a-l** представляют собой светло-жёлтые или белые кристаллические вещества, растворимые в хлороформе, ДМСО, ДМФА, при нагревании — в этаноле, уксусной кислоте, нерастворимые в воде, гексане.

В ИК спектрах соединений **4a-l** присутствуют характерные полосы поглощения валентных колебаний сопряженной с двойной связью карбонильной группы (C=O) при 1621–1675 см⁻¹, а также NH связи при 3150–3230 см⁻¹.

В спектрах ЯМР ¹H соединений **4a-l** наблюдаются характерные сигналы протонов метильной группы в виде синглета при 1.87–1.89 м.д., синглет протона в положении C⁷ гетероцикла при 6.64–6.95 м.д., уширенный синглет протона NH группы при 10.86–11.94 м.д. В спектре ЯМР ¹³C соединения **4i** присутствуют характерные сигналы атомов углерода метильной группы в области 19.08 м.д., атома углерода в положении C⁷ при 59.45 м.д. и атома углерода карбонильной группы при 193.94 м.д.

Характерным для масс-спектра соединения **4e** является наличие интенсивного пика молекулярного иона с *m/z* 378, а также пиков соответствующих фрагментных ионов.

Для подтверждения структуры и установления пространственного строения данного ряда веществ был проведен рентгеноструктурный анализ монокристалла соединения **4i**, полученного методом медленной кристаллизации из уксусной кислоты (см. рисунок).

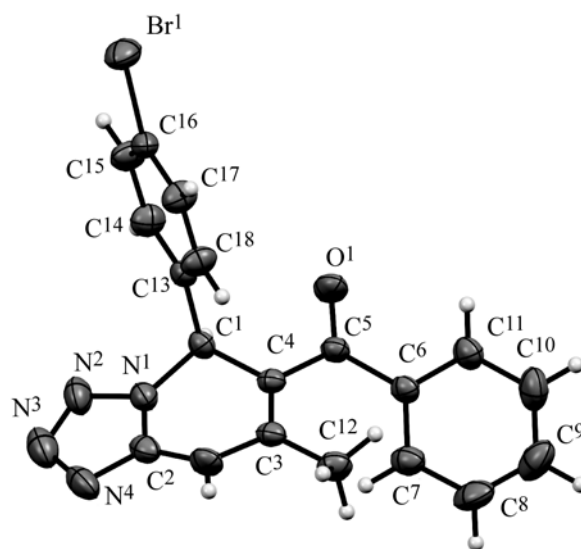
Соединение **4i** кристаллизуется в centrosymmetric пространственной группе моноклинной сингонии. Пиримидиновый цикл принимает конформацию *искаженная ванна*, атомы C¹ и N⁵ отклоняются от плоскости N¹C²C³C⁴ на 0.32 и 0.17 Å

соответственно. Неплоский бензоильный заместитель вследствие пространственных затруднений, создаваемых метильной группой, развернут на значительный угол относительно гетероциклической системы. Бромфенильный заместитель находится в псевдоаксиальном положении. В кристалле молекулы связаны в одномерные цепи, вытянутые вдоль оси *a*, за счет МВС N⁵–H⁵...O¹ [1–*x*, *y*, *z*]; N⁵–H⁵ 0.76(3), H⁵...O¹ 2.10(3), N⁵...O¹ 2.853(3) Å, угол N⁵H⁵O¹ 173(3)°.

Результаты PCA зарегистрированы в Кембриджском центре кристаллографических данных под номером CCDC 1952480 и могут быть запрошены по адресу www.ccdc.cam.ac.uk/data_request/cif.

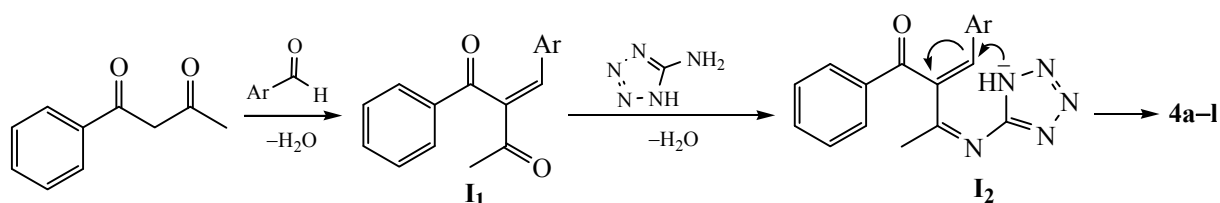
Образование соединений **4a-l** протекает, по видимому, по следующей схеме (схема 2).

На первой стадии образуется неопределённое соединение **I**, которое затем атакуется 5-амино-



Общий вид молекулы соединения **4i** по данным PCA в тепловых эллипсоидах 50% вероятности.

Схема 2.



тетразолом по карбонильной группе ацетильного остатка с последующей циклизацией интермедиата **I₂** в соединения **4a-1**. Реакция протекает регио-селективно вследствие того, что реакционная способность карбонильной группы в положении С¹ 1-фенил-1,3-бутандиона **1** понижена за счёт её сопряжения с фенильным заместителем.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры сняты на ИК Фурье-спектрометре ФСМ 1202 в вазелиновом масле. Спектры ЯМР ¹H, ¹³C записаны на спектрометре Bruker Avance III HD 400 с рабочей частотой 400 и 100 МГц соответственно в ДМСО-*d*₆, внутренний стандарт – ТМС. Масс-спектр соединения **4e** зарегистрирован методом ультра-ВЭЖХ-МС на приборе Waters ACQUITY UPLC I-Class, колонка Acquity UPLC BEH C18 1.7 мкм, масс-детектор Xevo TQD, ионизация пробы проводилась электрораспылением в режиме регистрации положительных ионов, температура источника 150°C, напряжение на капилляре 3500–4000 В, напряжение на конусе 20–70 В. Элементный анализ проведен на приборе Perkin Elmer 2400. Температура плавления измерена на приборе Melting Point M-565. Рентгеноструктурный анализ выполнен на монокристалльном дифрактометре Xcalibur Ruby с CCD-детектором по стандартной методике (MoK_α-излучение, 295(2) К, ω-сканирование с шагом 1°). Поглощение учтено эмпирически с использованием алгоритма SCALE3 ABSPACK [17]. Сингония кристалла (C₁₈H₁₄BrN₅O, *M* 396.25) моноклинная, пространственная группа *P*2₁/*c*, *a* 7.2663(17), *b* 18.978(5), *c* 11.930(3) Å, β 92.42(2)°, *V* 1643.8(7) Å³, *Z* 4, *d*_{выч} 1.601 г/см³; μ 2.518 мм⁻¹. Структура расшифрована с помощью программы Superflip [18] и уточнена полноматричным МНК по F² в анизотропном приближении для всех неводородных атомов с использованием программы SHELXL [19] с графическим интерфейсом OLEX2 [20]. Атом водорода группы NH уточнен независимо в изотропном приближении. При уточнении остальных атомов водорода

использована модель наездника. Окончательные параметры уточнения: *R*₁ 0.0433, *wR*₂ 0.0905 [для 2863 отражений с *I* > 2σ(*I*)], *R*₁ 0.0661, *wR*₂ 0.1037 (для всех 3818 независимых отражений), *S* 1.025.

(5-Метил-7-фенил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил)(фенил)метанон (4a). Смесь 1.62 г (0.01 моль) 1-фенил-1,3-бутандиона **1**, 1 мл (0.01 моль) бензальдегида **2a** и 1.03 г (0.01 моль) 5-аминотетразола моногидрата **3** выдерживали при температуре 160–170°C в течение 15 мин до прекращения газовой выделения и затвердевания реакционной смеси, смесь охлаждали, обрабатывали этанолом, выпавшие кристаллы отфильтровывали, перекристаллизовывали из этанола. Выход 2.01 г (63%), белые кристаллы, т.пл. 223–225°C (EtOH). ИК спектр, ν, см⁻¹: 3195 (NH), 1675 (C=O). Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ, м.д.: 1.88 с (3H, CH₃), 6.78 с (1H, CH), 7.25–8.36 м (10H_{аром}) 11.09 уш.с (1H, NH). Найдено, %: C 68.03; H 4.66; N 22.01. C₁₈H₁₅N₅O. Вычислено, %: C 68.13; H 4.76; N 22.07. *M* 317.34.

Соединения **4b-1** получали аналогично.

{7-(4-трет-Бутилфенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил}(фенил)метанон (4b). Выход 1.85 г (50%), кристаллы белого цвета, т.пл. 280–282°C (EtOH). ИК спектр, ν, см⁻¹: 3150 (NH), 1621 (C=O). Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ, м.д.: 1.21 с (9H, (CH₃)₃C), 1.87 с (3H, CH₃), 6.72 с (1H, CH), 7.17–7.54 м (9H_{аром}) 11.01 уш.с (1H, NH). Найдено, %: C 70.63; H 6.02; N 4.15. C₂₂H₂₃N₅O. Вычислено, %: C 70.76; H 6.21; N 4.28. *M* 373.45.

[7-(3-Метоксифенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4c). Выход 2.25 г (65%), кристаллы белого цвета, т.пл. 230–232°C (EtOH). ИК спектр, ν, см⁻¹: 3195 (NH), 1675 (C=C). Спектр ЯМР ¹H (ДМСО-*d*₆), δ, м.д.: 1.87 с. (3H, CH₃), 3.68 с (3H, CH₃O), 6.72 с (1H, CH), 6.76–7.66 м (9H_{аром}) 11.0 уш.с (1H, NH). Найдено, %: C 65.51; H 4.81; N 20.05. C₁₉H₁₇N₅O₂. Вычислено, %: C 65.69; H 4.93; N 20.16. *M* 347.37.

[7-(4-Этоксифенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4d). Выход 1.9 г (53%), кристаллы белого цвета, т.пл. 203–206°C (EtOH). ИК спектр, ν , см^{-1} : 3194 (NH), 1652 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.27 т (3H, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$, J 8.0 Гц), 1.88 с (3H, CH_3), 3.96 к (2H, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}$, J 8.0 Гц), 6.72 с (1H, CH), 6.83–8.34 м (9H_{аром}), 11.03 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 66.32; Н 5.19; N 19.15. $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{N}_5\text{O}_2$. Вычислено, %: С 66.47; Н 5.30; N 19.38. *M* 361.40.

[7-(2,5-Диметоксифенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4e). Выход 2.66 г (71%), кристаллы желтого цвета, т.пл. 242–244°C (EtOH). ИК спектр, ν , см^{-1} : 3195 (NH), 1626 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.84 с (3H, CH_3), 3.56 с и 3.61 с (6H, $2\text{CH}_3\text{O}$), 6.62 д (1H, CH, J 3.2 Гц), 6.79–7.56 м (8H_{аром}) 10.86 уш.с (1H, NH). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 378 (100) $[M + \text{H}]^+$. Найдено, %: С 63.42; Н 5.95; N 18.43. $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{N}_5\text{O}_3$. Вычислено, %: С 63.65; Н 6.07; N 18.56. *M* 377.39.

[7-(3,4-Диметоксифенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4f). Выход 2.22 г (59%), кристаллы жёлтого цвета, т.пл. 221–223°C (EtOH). ИК спектр, ν , см^{-1} : 3195 (NH), 1675 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.89 с (3H, CH_3), 3.66 с и 3.69 с (6H, $2\text{CH}_3\text{O}$), 6.68 с (1H, CH), 6.79–7.60 м (8H_{аром}) 11.94 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 63.53; Н 5.94; N 18.47. $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{N}_5\text{O}_3$. Вычислено, %: С 63.65; Н 6.07; N 18.56. *M* 377.39.

[7-(4-Диметиламинофенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4g). Выход 1.93 г (54%), кристаллы жёлтого цвета, т.пл. 244–246°C. ИК спектр, ν , см^{-1} : 3150 (NH), 1621 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.89 с (3H, CH_3), 2.84 с (6H, $(\text{CH}_3)_2\text{N}$), 6.64 с (1H, CH), 6.60–7.58 м (9H_{аром}), 10.95 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 66.58; Н 5.43; N 23.21. $\text{C}_{20}\text{H}_{20}\text{N}_6\text{O}$. Вычислено, %: С 66.65; Н 5.59; N 23.32. *M* 360.41.

[7-(3-Бромфенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4h). Выход 2.44 г (62%), кристаллы белого цвета, т.пл. 234–235°C. ИК спектр, ν , см^{-1} : 3170 (NH), 1675 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.87 с (3H, CH_3), 6.79 с (1H, CH), 7.29–7.58 м (9H_{аром}), 11.16 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 54.42; Н 3.48; N 17.53. $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{BrN}_5\text{O}$. Вычислено, %: С 54.56; Н 3.56; N 17.67. *M* 396.24.

[7-(4-Бромфенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4i). Выход 1.95 г (49%), бесцветные кристаллы, т.пл. 198–200°C. ИК спектр, ν , см^{-1} : 3230 (NH), 1629 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.87 с (3H, CH_3), 6.79 с (1H, CH), 7.28–8.34 м (9H_{аром}), 11.15 уш.с (1H, NH). Спектр ЯМР ^{13}C (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 19.08, 59.45, 106.74, 121.82, 128.03, 128.71, 129.7, 131.63, 132.2, 139.22, 139.97, 148.67, 193.94. Найдено, %: С 54.49; Н 3.44; N 17.61. $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{BrN}_5\text{O}$. Вычислено, %: С 54.56; Н 3.56; N 17.67. *M* 396.25.

[7-(2-Хлорфенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4j). Выход 2.66 г (76%), кристаллы белого цвета, т.пл. 217–219°C (EtOH). ИК спектр, ν , см^{-1} : 3190 (NH), 1629 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.88 с (3H, CH_3), 7.15 с (1H, CH), 7.31–8.35 м (9H_{аром}), 11.17 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 61.42; Н 3.91; N 19.89. $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{ClN}_5\text{O}$. Вычислено, %: С 61.46; Н 4.01; N 19.91. *M* 351.78.

[7-(4-Хлорфенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4k). Выход 2.75 г (78%), кристаллы светло-жёлтого цвета, т.пл. 225–227°C (EtOH). ИК спектр, ν , см^{-1} : 3170 (NH), 1675 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.84 с (3H, CH_3), 6.80 с (1H, CH), 7.37–7.66 м (9H_{аром}), 11.21 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 61.39; Н 3.93; N 19.89. $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{ClN}_5\text{O}$. Вычислено, %: С 61.46; Н 4.01; N 19.91. *M* 351.78.

[7-(4-Нитрофенил)-5-метил-4,7-дигидротетразоло[1,5-*a*]пиримидин-6-ил](фенил)метанон (4l). Выход 2.49 г (69%), кристаллы белого цвета, т.пл. 185–187°C (EtOH). ИК спектр, ν , см^{-1} : 3175 (NH), 1675 (C=O). Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.: 1.86 с (3H, CH_3), 6.95 с (1H, CH), 7.44–8.16 м (9H_{аром}) 11.27 уш.с (1H, NH). Найдено, %: С 59.65; Н 3.77; N 23.08. $\text{C}_{18}\text{H}_{14}\text{N}_6\text{O}_3$. Вычислено, %: С 59.67; Н 3.89; N 23.19. *M* 362.34.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Taylor R.D., MacCoss M., Lawson A.D. *J. Med. Chem.* **2014**, *57*, 5845–5859. doi 10.1021/jm4017625
2. Шкурко О.П., Толстикова Т.Г., Седова В.Ф. *Усп. хим.* **2016**, *85*, 1056–1096. [Shkurko O.P., Tolstikova T.G.,

- Sedova V.F. *Russ. Chem. Rev.* **2016**, *85*, 1056–1096. doi 10.1070/RCR4586
3. Popova E.A., Protas A.V., Trifonov R.E. *Anticancer Agents Med. Chem.* **2017**, *17*, 1856–1868. doi 10.2174/1871520617666170327143148
 4. Русинов В.Л., Чарушин В.Н., Чупахин О.Н. *Изв. АН. Сер. хим.* **2018**, *67*, 573–599. [Rusinov V.L., Charushin V.N., Chupakhin O.N. *Russ. Chem. Bull.* **2018**, *67*, 573–599.] doi 10.1007/s11172-018-2113-8
 5. Dougherty A.M., Guo H., Westby G., Liu Y., Simsek E., Guo J.-T., Mehta A., Norton P., Gu B., Block T., Cuconati A. *Antimicrob. Agents Chemother.* **2007**, *51*, 4427–4437. doi 10.1128/AAC.00541-07
 6. Гейн В.Л., Мишунин В.В., Цыплякова Е.П., Винокурова О.В., Вахрин М.И. *Хим.-фарм. ж.* **2009**, *43*, 10–12. [Gein V.L., Mishunin V.V., Tsypliyakova E.P., Vinokurova O.V., Vakhryn M.I. *Pharm. Chem. J.* **2009**, *43*, 652–654.] doi 10.1007/s11094-010-0373-1
 7. Гейн В.Л., Замараева Т.М., Мишунин В.В., Котегов В.П. *ЖОХ.* **2016**, *86*, 258–262. [Gein V.L., Zamaraeva T.M., Mishunin V.V., Kotegov V.P. *Russ. J. Gen. Chem.* **2016**, *86*, 286–290.] doi 10.1134/S1070363216020134
 8. Гейн В.Л., Панова О.С., Сыропятов Б.Я., Ковалева М.Ю. Пат. 2413730. РФ.
 9. Raju C., Madhaiyan K., Spridhar R., Ramakrishna S. *RSC Adv.* **2012**, *2*, 11657–11663. doi 10.1039/C2RA21330C
 10. Cioc R.C., Ruijter E., Orru R.V.A. *Green. Chem.* **2014**, *16*, 2958–2975. doi 10.1039/C4GC00013G
 11. Murlykina M.V., Morozova A.D., Zviagin I.M., Sakhno Y.I., Desenko S.M., Chebanov V.A. *Front. Chem.* **2018**, *6*, 527–569. doi 10.3389/fchem.2018.00527
 12. Sakho Y.I., Desenko S.M., Shishkina S.V., Shishkin O.V., Sysoyev D.O., Groth U., Kappe C.O., Chebanov V.A. *Tetrahedron.* **2008**, *64*, 11041–11049. doi 10.1016/j.tet.2008.09.089
 13. Maleki A., Ravaghi P., Aghaei M., Movahed H. *Res. Chem. Intermed.* **2017**, *43*, 5485–5494. doi 10.1007/s11164-017-2941-4
 14. Kour P., Singh V.P., Khajuria B., Singh T., Kumar A. *Tetrahedron Lett.* **2017**, *58*, 4179–4185. doi 10.1016/j.tetlet.2017.09.052
 15. Dolzhenko A.V. *Heterocycles.* **2017**, *94*, 1819–1846. doi 10.3987/REV-17-867
 16. Гейн В.Л., Замараева Т.М. *ЖОХ.* **2016**, *86*, 160–162. [Gein V.L., Zamaraeva T.M. *Russ. J. Gen. Chem.* **2016**, *86*, 196–198.] doi 10.1134/S1070363216010321
 17. *CrysAlisPro*, Agilent Technologies, Version 1.171.37.33 (release 27-03-2014 CrysAlis171 .NET)
 18. Palatinus L., Chapuis G. *J. Appl. Cryst.* **2007**, *40*, 786–790. doi 10.1107/S0021889807029238
 19. Sheldrick G.M. *Acta Cryst.* **2015**, *C71*, 3–8. doi 10.1107/S2053229614024218
 20. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. *J. Appl. Cryst.* **2009**, *42*, 339–341. doi 10.1107/S0021889808042726

Synthesis of (7-Aryl-5-methyl-4,7-dihydro-tetrazolo[1,5-*a*]-pyrimidin-6-yl)(phenyl)methanones

V. L. Gein^{a,*}, A. N. Prudnikova^a, A. A. Kurbatova^a, and M. V. Dmitriev^b

^a Perm State Pharmaceutical Academy, 614990, Russia, Perm, ul. Polevaya 2

*e-mail: geinvl48@mail.ru

^b Perm State University, 614990, Russia, Perm, ul. Bukireva 15

Received September 17, 2019; revised January 16, 2020; accepted January 17, 2020

Three-component reaction of 1-phenyl-1,3-butandione with aromatic aldehydes and 5-aminotetrazole monohydrate proceeds in the absence of any solvent and catalyst at a temperature 160–170°C for 15–20 min with the formation of (7-aryl-5-methyl-4,7-dihydro-tetrazolo[1,5-*a*]pyrimidin-6-yl)(phenyl)methanones.

Keywords: multicomponent reactions, Biginelli reaction, 1-phenyl-1,3-butandione, 5-aminotetrazole, 4,7-dihydro-tetrazolo[1,5-*a*]pyrimidine