***β*-Изотиоцианатокетоны в синтезе 6-фенилтиозамещенных**

**тетрагидро- и пергидро-1,2,4-триазепин-3-тионов**

***Кувакин А.С, Шуталев А.Д.***

*Аспирант, 4 год обучения*

*Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

*E-mail: a.s.kuvakin@ioc.ac.ru*

1,2,4-Триазепин-3-тионы привлекают внимание исследователей в связи с наличием у этих соединений разнообразных практически полезных свойств. Среди известных способов получения этих соединений важное место занимает метод, основанный на реакции β-изотиоцианатокетонов с гидразинами. Однако, из-за малого ассортимента доступных изотиоцианатокетонов использование этого метода достаточно ограничено. Настоящая работа посвящена синтезу 6-фенилтиозамещенных тетрагидро- и пергидро-1,2,4-триазепин-3-тионов на основе соответствующих β-изотиоцианатокетонов.

Ранее неизвестные изотиоцианатокетоны **1** были синтезированы присоединением тиоциановой кислоты к α,β-непредельным кетонам **2**. Нами показано, что реакция изотиоцианатов **1** с метилгидразином или этилгидразином протекает легко и полностью региоселективно в MeCN с образованием соответствующих 2-алкил-4-(*γ*-оксоалкил)-тиосемикарбазидов **3** с высокими выходами (Схема 1).



Схема 1. Синтез тиосемикарбазидов **3** из β-изотиоцианатокетонов **1**.

Нами показано, что кислотно-катализируемая циклизация соединений **3** приводит к образованию соответствующих 6-фенилтиозамещенных тетрагидро-1,2,4-триазепин-3-тионов **4** (Схема 2).



Схема 2. Синтез 6-фенилтиозамещенных 1,2,4-триазепин-3-тионов **4** и **5**.

Условия гетероциклизации соединений **3** были оптимизированы. Обнаружено, что реакция чувствительна к природе кислоты и растворителя. Было исследовано влияние относительной конфигурации исходных тиосемикарбазидов **3** на скорость превращения и показано, что реакция с участием (1*R\*,*2*R\**)-диастереомера протекает медленнее, чем с участием (1*R\*,*2*S\**)-диастереомера.

Полученные триазепинтионы **4** под действием NaBH3CN в метаноле в слабокислой среде претерпевают восстановление до соответствующих 6-фенилтиозамещенных 1,2,4-триазепан-3-тионов **5**.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ*, *проект* 23-23-00324*.*