

研究论文

2-甲硫基-7(5)-取代-3-吡唑并[1,5-*a*]嘧啶甲酸乙酯的区域选择性合成与2D NMR 研究

李明*^{1,2}, 郭维斯¹, 文丽荣¹, 钟惠民¹, 杨华铮²

(¹青岛科技大学化学与分子工程学院 青岛 266042)

(²南开大学元素有机化学国家重点实验室 天津 300071)

收稿日期 2004-8-12 修回日期 2005-1-4 网络版发布日期 接受日期

摘要 利用3-甲硫基-4-乙氧羰基-5-氨基-1*H*-吡唑分别与甲基/芳基烯胺酮反应, 合成了8种新的化合物2-甲硫基-7-取代-3-吡唑并[1,5-*a*]嘧啶甲酸乙酯(**3a**~**3g**)和2-甲硫基-5-甲基-3-吡唑并[1,5-*a*]嘧啶甲酸乙酯(**4a**).

化合物的结构均经元素分析, IR, ¹H NMR, MS所证实, 异构体**3a**和**4a**的结构进一步由¹³C NMR, HMQC和HMBC确认. 同时, 探讨了区域选择性合成吡唑并[1,5-*a*]嘧啶类化合物可能的反应机理, 并对部分化合物杀菌活性进行了测试.

关键词 [吡唑并\[1,5-*a*\]嘧啶](#) [二维核磁](#) [反应机理](#) [区域选择性](#) [合成](#)

分类号

Regioselective Synthesis and 2D NMR Research of Ethyl 2-Methyl-thio-7(5)-substituted Pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidine-3-carboxylate

LI Ming*^{1,2}, GUO Wei-Si¹, WEN Li-Rong¹, ZHONG Hui-Min¹, YANG Hua-Zheng²

(¹ College of Chemical and Molecular Technology, Qingdao University of Science and Technology, Qingdao 266042)

(² State Key Laboratory of Elemento-Organic Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071)

Abstract By the reaction of 3-methylthio-4-ethoxycarbonyl-5-amino-1*H*-pyrazole with substituted enamines, eight new compounds of ethyl 2-methylthio-7-substituted pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidine-3-carboxylate (**3a**~**3g**) and ethyl 2-methylthio-5-methyl pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidine-3-carboxylate (**4a**) have been synthesized respectively. The structures of all compounds were characterized by elemental analyses, IR, ¹H NMR, and MS. Structures of regioisomer **3a** and **4a** were further determined by ¹³C NMR, HMQC and HMBC. In the meantime, the plausible mechanism for regioselective synthesis of pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidine was discussed. The preliminary test showed that some of the compounds had somewhat antifungal activities.

Key words [pyrazolo\[1,5-*a*\]pyrimidine](#) [2D NMR](#) [reaction mechanism](#) [regioselectivity](#) [synthesis](#)

DOI:

通讯作者 李明 liming928@263.net

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(288KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“吡唑并\[1,5-*a*\]嘧啶” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [李明](#)
- [郭维斯](#)
- [文丽荣](#)
- [钟惠民](#)
- [杨华铮](#)