*УДК 547.854.83:544.183.25*

**Е. С. Титова, А. И. Рахимов, В. А. Бабкин, А. В. Игнатов,**
**Г. Е. Заиков, О. В. Стоянов, Pearce Eli M**

# СИНТЕЗ 1,3-ДИ-[4-(6-МЕТИЛ-4-ПИРИМИДИНОН-2-ТИО)БЕНЗИЛ]-5-(4-БРОМБЕНЗИЛ)АДАМАНТАНА

*Ключевые слова: 1,3-ди-[4-(6-метил-4-пиримидинон-2-тио)бензил]-5-(4-бромбензил)адамантан, нуклеофильное замещение.*

*1,3-ди-[4-(6-метил-4-пиримидинон-2-тио)бензил]-5-(4-бромбензил)адамантан был синтезирован реакцией нуклеофильного замещения брома в п-(1-адамантил)бензилбромиде.*

*Keywords: 1,3-di-[4-(6-methyl-4-pyrimidinon-2-thio)benzyl]-5-(4-brominbenzyl)adamantine, nucleophylic substitution.*

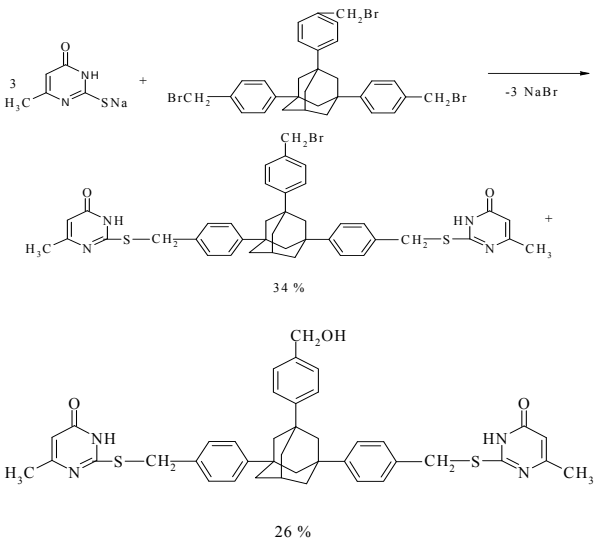
*1,3-di-[4-(6-methyl-4-pyrimidinon-2-thio)benzyl]-5-(4-brominbenzyl)adamantine was synthesized by nucleophylic substitution reaction of bromine in para-(1-adamantyl)benzylbromid.*

## Цель работы

Целью работы является синтез 1,3-ди-[4-(6-метил-4-пиримидинон-2-тио)бензил]-5-(4-бромбензил)адамантана.

## Методическая часть

При проведении реакции тиоаниона, генерируемого из натриевой соли 6-метил-2-тиоурацила [1-6], в количестве 3-х молей с 1 молем 1,3-ди-(*п*-бромбензил)адамантана в водно-диоксановой среде при температуре 50 $^0$C в течение 1ч произошло замещение галогена только в двух бромбензильных группах. Реакция проводилась аналогично описанным в литературе [7-12].



## Результаты исследований

Результаты исследований показали, что третья бромбензильная группа в реакцию не вступила. В соединении обнаружен бром пробой Бельштейна. По-видимому, это связано с очень медленной скоростью протекания реакции нуклеофильного замещения. Параллельно с основной реакцией в водно-диоксановой среде идет гидролиз бромбензильной группы. Таким образом в процессе проведения синтеза обнаружено образование смеси продуктов: 1,3-ди-[4-(6-метил-4-пиримидинон-2-тио)бензил]-5-(4-бромбензил)адамантана (1) с выходом 34 % и 1,3-ди-[4-(6-метил-4-пиримидинон-2-тио)бензил]-5-(4-гидроксибензил)адамантана (2) с выходом 26 %. Строение и состав полученных веществ доказано методом ПМР-спектроскопии и данными элементного анализа. В соединении (1) найдено: N 7.28 %, вычислено: N 7.31 %; в соединении (2) найдено: N 7.88 %, вычислено: N 7.96 %.

## Литература

1. S- и О-анионы, генерируемые из 6-метил-2-тио-, 2-алкил(аралкил)тиоурацилов, в синтезе S-моно- и S-,О-диалкил-, бензилпроизводных: дисс. … канд. хим. наук / Титова Е.С. Волгоград, 2005.
2. Рахимов А.И., Титова Е.С., Федунов Р.Г., Бабкин В.А., Белоусова В. С., Русанова С. Н., Заиков Г.Е. Реакционная способность S- и О-анионов, генерируемых из 6-метил-2-тио-, 2-тиоалкил(аралкил)урацилов // Вестник Казанского технологического университета. - 2013. - Т. 16, № 5. - С. 16-20.
3. Рахимов А.И., Титова Е.С., Федунов Р.Г., Бабкин В.А. Квантово-химический анализ реакционной способности S- и О-анионов, генерируемых из 6-метил-2-тио-, 2-алкил(аралкил)тиоурацилов // Известия волгоградского государственного технического университета. 2008.Т. 1. № 5. С. 70 – 75.
4. Бабкин В.А., Рахимов А.И., Титова Е.С., Федунов Р.Г., Решетников Р.А., Белоусова В. С., Заиков Г.Е.Квантово-химические исследования механизма синтеза 2-метил(бензил)тио-4-метил(бензил)оксипиримидина // Химическая физика и мезоскопия. 2007. Т. 9. № 3. С. 263-275.
5. Рахимов А.И., Бабкин В.А., Титова Е.С., Федунов Р.Г., Белоусова В.С., Заиков Г.Е.Теоретический анализ реакционной способности s- и о-анионов, генерируемых из 6-метил-2-тио-, 2-тиоалкил(аралкил) урацилов // В сб. Теоретические и прикладные аспекты квантово-химических расчетов уникальных молекулярных систем; сборник статей: к 59-летию со дня рождения профессора В. А. Бабкина.; под редакцией В. А. Бабкина. Волгоград, 2011. С. 41-50.
6. Rakhimov A.I., Titova E.S. Synthesis of 2-alkyl(aralkyl)sulfanyl-6-methylpyrimidin-4(3h)-ones and 4-alkyl(aralkyl)oxy-2-alkyl(aralkyl)sulfanyl-6-methylpyrimidines // Russian Journal of Organic Chemistry. 2007. Т. 43. № 1. С. 96-102.
7. Рахимов А.И., Титова Е.С., Федунов Р.Г., Бабкин В.А., Стоянов О. В., Заиков Г.Е. Способ получения 1,3-ди[4-(6-метил-4-пиримидинон-2-тио)метилфенил]адамантана.

Рахимов А.И., Титова Е.С. патент на изобретение RUS 231141211.07.2006
8. Рахимов А.И., Попов Ю.В., Титова Е.С. Нуклеофильное замещение в бензил 1-(хлорметил)-3-феноксибензилхлоридах с участием 4-метил-6-оксо-1,6-дигидро-2-пиримидинтиолат аниона // Известия волгоградского государственного технического университета. 2005. № 1. С. 61 – 64.
9. Рахимов А.И., Титова Е.С. Особенности синтеза 2-алкил(арилалкил)тио-6-метилпиримидин-4(3Н)-онов и 2-алкил(арилалкил)тио-4-алкил(арилалкил)окси-6-метилпиримидинов // ЖОХ. 2007. Т. 43. № 1. С. 92-98.
10. Генерация S- и О-анионов из 6-метил-2-тио-, 2-алкил(аралкил)тиоурацилов в синтезе S-моно- и S-,О-дипроизводных// Вестник Казанского технологического университета. - 2013. - Т. 16, № 5. - С. 23-29.
11. Рахимов А.И., Титова Е.С. Синтез симметричных и несимметричных S-,О-дипроизводных 6-метил-2-тиоурацила // Известия волгоградского государственного технического университета. 2006. № 1. С. 66 – 72.
12. Рахимов А.И., Титова Е.С., Федунов Р.Г., Бабкин В.А.Особенности нуклеофильного замещения в алкил- и бензилгалогенидах анионами, генерируемыми из 4-гидрокси-2-меркапто-6-метилпиримидина // Химия гетероциклических соединений. 2008. № 6. С. 874-883.

---

© **Е. С. Титова** — к.х.н. доц. каф. органической химии Волгоградского госуд. технич. ун-та, titova0512@rambler.ru; **А. И. Рахимов** — д-р хим. наук, проф. той же кафедры, акад. РАЕН, organic@vstu.ru; **В. А. Бабкин —** д-р хим. наук, проф., акад. РАЕ, акад. Международной академии «Контенант», нач. научн. отдела Себряковского филиала Волгоградского госуд. ун-та; **А. В. Игнатов —** студ. того же вуза, bartsimpson35@yandex.ru; **Г. Е. Заиков —** д-р хим. наук, проф., акад. Международной академии наук (Мюнхен, Германия), Институт биохимической физики, РАН, Москва, chembio@sky.chph.ras.ru; **О. В. Стоянов —** д-р техн. наук, проф., зав. каф. технологии пластических масс КНИТУ, stoyanov@mail.ru; **Pearce Eli M -** Herman F. Mark Polymer Research Institute Polytechnic University.

© **E. S. Titova** – Candidate of Chemical Sciences, professor of department “Organic Chemistry” of Volgograd State Technical University. E-mail: titova0512@rambler.ru; **A. I. Rakhimov** – Doctor of Chemical Sciences, professor, academician of Russian Academy of Natural Sciences. Department “Organic Chemistry” of Volgograd State Technical University. E-mail: organic@vstu.ru; **V. A. Babkin** – Doctor of Chemical Sciences, professor, academician of international academy “Contenant”, Head of Science department of Volgograd State Architecture Building University, Sebryakov’s Branch. E-mail: Babkin_v.a@mail.ru; **A. V. Ignatov** – student of Volgograd State Architecture Building University, Sebryakov’s Branch. E-mail: Bartsimpson35@yandex.ru; **G. E. Zaikov** – Doctor of Chemical Sciences, professor, academician of international academyof Science (Munich, Germany), Honored scientist of Russian Federation. Institute of Biochemical Physics, Moscow. E-mail: chembio@sky.chph.ras.ru; **O. V. Stoyanov** – Doctor of Engineering Sciences, professor of department “Technology of plastic masses” of Kazan State Technical University. E-mail: stoyanov@mail.ru; **Pearce Eli M -** Herman F. Mark Polymer Research Institute Polytechnic University.