

Цель работы Ранее нами был осуществлен синтез S-монопроизводного 6-метил-2-тиоурацила (I) [1-8] 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она (II). Целью настоящей работы является синтез вещества (II) реакцией нуклеофильного замещения хлора в бензилхлориде 6-метилпиримидин-4(3H)-он-2-тиильным анионом в водно-диоксановой среде в присутствии натриевой щелочи

Методическая и экспериментальная часть работы Вышепредставленная реакция нуклеофильного замещения идет в гомогенных условиях, при низких температурах (30 - 50 0C), в течение короткого промежутка времени (15 - 60 мин.), через стадию образования тиоаниона (I) [9-11]. Представлялось интересным определить механизм данной реакции. Для этого из трехгорлого реактора, снабженного мешалкой и термометром, помещенного в термостат, через каждые две минуты отбирали пробу. Количество моноватриевой соли 6-метил-2-тиоурацила в пробе определяли потенциометрическим титрованием стандартным 0.1 н раствором H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, приготовленным из стандарт-титра, на приборе иономер универсальный ЭВ-74. В качестве электрода сравнения использовали каломельный электрод, в качестве измерительного (индикаторного) электрода - стеклянный. Результаты исследований По данным изменения мольной концентрации моноватриевой соли тиоурацила строили кинетические кривые в зависимости от времени. Графическим методом были определены порядок и энергия активации данной реакции. Порядок реакции равен  $n=2$ , энергия активации составила 88.05 кДж / моль . К. Для подтверждения бимолекулярного механизма реакции экспериментально была проведена серия опытов с различными начальными концентрациями обоих реагентов для реакции (I) с бензилхлоридом при температуре 50 0 C. Результаты сведены в табл. 1. Таблица 1 - Влияние мольного соотношения реагентов на скорость реакции и выход 6-м-пиримидин-4(3H)-она

Мольное соотношение Бензилхлорид : 6-метил-2-тиоурацил	К, л / моль·с	Выход, %
1.0 : 1.0	0.03	91.7
1.2 : 1.0	0.12	93.4
1.0 : 1.2	0.08	92.3

Из приведенной таблицы видно, что скорость реакции зависит от концентрации обоих реагентов, и, следовательно, кинетическая модель данной реакции выражается уравнением  $V = k \cdot CA \cdot CB$  (1) где V - скорость реакции, моль / л · с; CA - концентрация 6-метил-2-тиоурацила, моль/л; CB - концентрация хлористого бензила, моль/л Для выявления оптимальных условий синтеза, была проведена серия опытов с различным соотношением вода:диоксан в реакционной среде. Результаты сведены в табл. 2. Таблица 2 - Влияние соотношения вода : диоксан на скорость реакции и выход 6-м-пиримидин-4(3H)-она

Вода : диоксан	К, л / моль·с	Выход, %
1 : 1	0.012	80.2
1 : 1,3	0.02	89.7
1 : 1.6	0.03	91.7

Заключение Увеличение скорости реакции с повышением содержания диоксана согласуется с SN<sub>2</sub> механизмом реакции, поскольку при реакции по SN<sub>1</sub> механизму ионизации галагенопроизводного с образованием карбониевого катиона способствует более полярная среда (вода). В тоже время диоксан, взаимодействуя с карбкатионами своей неподеленной

парой электронов атома кислорода, блокирует реакционный центр, что должно снижать скорость SN1 реакции.