

Цель работы С целью расширения ассортимента производных 6-метил-2-тиоурацила были разработаны методы введения различных групп по S- и O-атомам [1-8]. Одним из таких методов синтеза является нуклеофильное замещение галогена галогенпроизводных на S- и O-анионы, генерируемые из 6-метил-2-тио-, 2-алкил(аралкил)тиоурацилов [9-12]. Методическая часть Изменение концентрации S-натриевой соли при ее взаимодействии с галогенпроизводным определялось методом потенциометрического титрования и вычислялись константы скорости реакций методом дифференцирования кинетических кривых. Строение и состав синтезированных соединений доказывали методами ИК-, ПМР-, масс-спектроскопии, данными элементного анализа на азот. Результаты исследований Влияние природы галогена и углеводородного остатка галогенпроизводного на выход S-монопроизводных отражено в табл.1. Константа скорости для бензилгалогенидов, пропилиодида и этилбромиды имеет второй порядок, а для аллилгалогенидов - первый. Константа скорости нуклеофильного замещения зависит от природы галогена и снижается в ряду:  $I > Br > Cl$  в 1.6 раз. При введении м-фенокси группы в молекулу бензилхлорида константа скорости уменьшается в 5.8 раз, при введении в пара-положение бензольного кольца адамантильного заместителя константа скорости реакции уменьшается в 2 раза, при введении в пара-положение сульфотриидной группировки константа скорости реакции уменьшается, по сравнению с незамещенным бензилбромидом, в 7 раз. Это можно объяснить с точки зрения стерических факторов. Известно, что переходное состояние SN<sub>2</sub>-реакции близко к тригональной пирамиде, и у реакционного центра находится пять заместителей. Введение объемного заместителя приводит к увеличению стерического отталкивания в переходном состоянии. Это приводит к дестабилизации переходного состояния относительно исходного и, следовательно, к уменьшению скорости замещения. Таблица 1 - Зависимость выхода S-монопроизводных 6-метил-2-тиоурацила от условий реакции и природы галогенпроизводного при 50 °C № R Галогенпроизводное Константа скорости, л/моль · с Выход, %

1	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	BrCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.055	99
2	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	ClCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	0.035	91
3	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (m-OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )	ClCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (m-OC <sub>6</sub> H <sub>5</sub> )	0.006	84
4	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (p-Ad)	BrCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (p-Ad)	0.029	97
5	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	ICH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0.005	94
6	CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	BrCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	0.003	84
7	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (o-Br), CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (p-Br)	BrCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (p-Br), BrCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (o-Br)	0.080	99
8	CH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (p-SOF <sub>2</sub> )	BrCH <sub>2</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> (p-SOF <sub>2</sub> )	0.008	72
9	CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>	BrCH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>	0.006a	98
10	CH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>	ICH <sub>2</sub> -CH=CH <sub>2</sub>	0.0095a	99

а константа скорости имеет размерность с<sup>-1</sup>.