

Цель работы Целью настоящей работы является изучение двухстадийного синтеза S-,O-дипроизводных 6-метил-2-тиоурацила, идущего через стадию получения S-производных 6-метил-2-тиоурацила, являющихся в данной реакции промежуточными соединениями. Образование S,O-дипроизводных 6-метил-2-тиоурацила идет через стадию образования S-монопредельного [1-12]. По изменению концентрации O-натриевой соли 6-метил-2-алкил(аралкил)тиоурацила можно судить о кинетике процесса.

Экспериментальная и методическая часть Нами были проведены опыты для определения влияния температуры на константу скорости данной реакции. Изменение концентрации O-натриевой соли 6-метил-2-алкил(аралкил)тиоурацила определялось методом отбора проб и определением концентрации натриевой соли потенциометрическим титрованием стандартным раствором 0.1 н H₂SO₄. В 10 мл воды растворили 0.2 г (5.0 ммоль) NaOH и 1.0 г (4.4 ммоль) 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она. O-натриевую соль 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она выпаривали и перекристаллизовывали из этанола. В 7 мл воды растворили 0.63 г (2.5 ммоль) O-натриевой соли 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она, добавили 18 мл диоксана. Отобрали пробу объемом 1 мл для определения начальной концентрации O-натриевой соли 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она и поместили ее в стаканчик, содержащий 30 мл дистиллированной воды. Полученный раствор загрузили в реактор, реактор поместили в термостат, нагретый до 50 0 С. После достижения реакционной массы заданной температуры, добавили 0.25 мл (2.2 ммоль) бензилхлорида. Каждые две минуты отбирали пробу объемом 1 мл, переносили в стаканчик с дистиллированной водой, титровали мононатриевую соль 6-метил-2-тиоурацила 0.1 н раствором H₂SO₄. Через 60 мин реакционную массу упарили в вакууме, выпавший осадок промыли холодной водой и перекристаллизовали из бензола. Получили 0.62 г (67 %) 2-бензилтио-4-бензилокси-6-метилпиримидин, т. пл. 59 - 61 0С. Таблица 1 - Исследование влияния температуры в реакции 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она с бензилхлоридом , соотношение реагентов 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-он : бензилхлорид = 1 : 1 T = 50 0С T = 40 0С T = 30 0С

Время, мин	С, моль/л	Время, мин	С, моль/л	Время, мин	С, моль/л
0	0.38	0	0.38	0	0.38
1	0.35	1	0.36	1	0.37
2	0.33	2	0.345	2	0.36
4	0.28	4	0.31	4	0.345
6	0.25	6	0.285	6	0.335
8	0.23	8	0.265	8	0.33
10	0.225	10	0.25	10	0.325

Выход 2-бензилтио-4-бензилокси-6-метилпиримидина, % 67
Выход 2-бензилтио-4-бензилокси-6-метилпиримидина, % 54
Выход 2-бензилтио-4-бензилокси-6-метилпиримидина, % 41

Результаты исследований По результатам экспериментальных данных построены зависимости изменения концентрации O-натриевой соли 6-метил-2-алкил(аралкил)тиоу-рацила от времени, представленные на рис. 1. 1- T = 50 0С, 2 - T = 40 0С, 3 - T = 30 0С

Рис. 1 - Зависимость изменения концентрации O-натриевой соли 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она во времени в реакции 2-бензилтио-6-

метилпиримидин-4(3H)-она с бензилхлоридом при соотношении реагентов 1:1 моль, при различных значениях температуры. По данным полученных зависимостей (рис. 1) дифференциальным графическим методом были определены константы скорости реакции 6-метил-2-тиоурацила с бензилхлоридом при разных значениях температур. - 1 - $T = 50\text{ }^{\circ}\text{C}$, 2 - $T = 40\text{ }^{\circ}\text{C}$, 3 - $T = 30\text{ }^{\circ}\text{C}$. Рис. 2 - Зависимость десятичного логарифма средней концентрации О-натриевой соли от десятичного логарифма изменения концентрации во времени для реакции с 2-бензилтио-6-метилпиримидин-4(3H)-она с бензил хлоридом, при мольном соотношении реагентов = 1:1. С ростом температуры реакции от $30\text{ }^{\circ}\text{C}$ до $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ константа скорости реакции растет: $K(\text{бензилхлорид}, 30\text{ }^{\circ}\text{C}) = 0.00095\text{ л / моль}\cdot\text{с}$, $K(\text{бензилхлорид}, 40\text{ }^{\circ}\text{C}) = 0.0019\text{ л / моль}\cdot\text{с}$, $K(\text{бензилхлорид}, 50\text{ }^{\circ}\text{C}) = 0.0036\text{ л / моль}\cdot\text{с}$. (см. рис. 2).