

РЕАКЦИИ КОНКУРЕНТНОГО *N*- И *O*-АЛКИЛИРОВАНИЯ 5-БРОМ-2-МЕТИЛТИОУРАЦИЛОВ

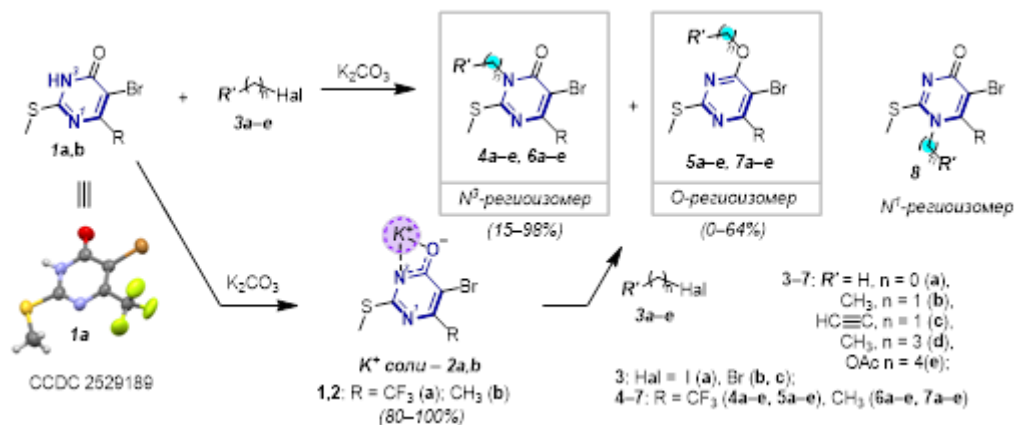
Курганова Е.А.⁽¹⁾, Мельников О.Э.⁽²⁾, Елькина Н.А.⁽²⁾,
Бургарт Я.В.⁽²⁾, Щегольков Е.В.⁽²⁾, Салоутин В.И.⁽²⁾

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт органического синтеза УрО РАН
620066, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 22

Пиримидины, и особенно тиюрацилы, играют неоспоримо важную роль в медицинской химии при создании фармакологически значимых молекул, при этом их фторированные производные также находят широкое применение в клинической практике.

Синтезированы 5-бром-6-(трифторметил)метилтиоурацил **1a** и его нефторированный аналог **1b**. Показаны пути их модификации в реакциях конкурентного *N*³- и *O*-алкилирования галогеналканами **3a-e** с различной длиной углеродной цепи и терминальным заместителем. Обнаружено образование в реакционной смеси калиевых солей пиримидин-4-онов **2a-d**, которые, предположительно, являются реакционноспособными интермедиатами в ходе процесса алкилирования. Проанализированы условия, способствующие преимущественному формированию *N*³-изомеров **4a-e** и **6a-e** или *O*-региоизомеров **5a-e** и **7a-e**, при этом во всех случаях мы не наблюдали образование *N*¹-региоизомеров **8**. Региоизомерное строение соединений **4-7** установлено на основании анализа данных спектроскопии ¹H, ¹³C, ¹⁹F ЯМР, дополненных 2D спектрами HSQC и HMBS, а также ИК-спектроскопии. Определено, что соотношение образующихся *N*³- и *O*-региоизомеров зависит от длины цепи алкилирующих агентов **3a-e**.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 24-13-00427.