

**ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
6-ТРИФТОРМЕТИЛ-2-ТИОУРАЦИЛА
И ЕГО ДИАЛКИЛЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ**

*Шатунова Т.В.⁽¹⁾, Первова М.Г.⁽²⁾, Худина О.Г.⁽²⁾, Иванова А.Е.⁽²⁾,
Бургарт Я.В.⁽²⁾, Салютин В.И.⁽²⁾*

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

⁽²⁾ Институт органического синтеза УрО РАН
620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 22

Полифтортиоурацилы обладают большим спектром биологического действия. Так, 6-трифторметил-2-тиоурацил обладает высокой антипаразитарной активностью. Для ряда S,O-замещенных тиоурацилов выявлено противовоспалительное, анальгетическое и противоэпилептическое действие. Гербицидные свойства проявляют различные N- и N,N-дизамещенные тиоурацилы.

Целью настоящей работы было исследование методом ГХ/МС тиоурацила **I** и полученных на его основе S,N- и S,O-диалкилзамещенных производных.

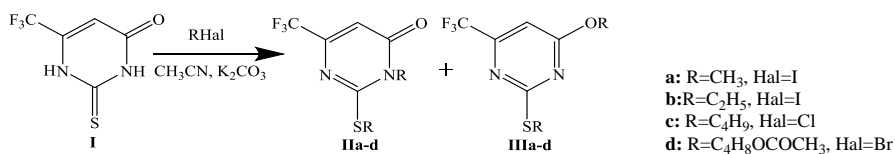


Схема синтеза диалкилзамещенных производных тиоурацила **I**

В масс-спектре тиоурацила **I** проявляется пик молекулярного иона (M⁺) с интенсивностью 83 %, максимальной – обладает пик иона с m/z 68 [C₂H₂NCO]⁺. Характеристичным пиком является пик иона [M-F]⁺. Также регистрируются пики ионов [M-HS]⁺, [M-CO]⁺, [M-NCS]⁺.

При исследовании S,O- и S,N-диалкилзамещенных производных **II**, **III** показано, что увеличение длины алкильного заместителя не влияет на характер фрагментации молекулярных ионов. Основным путем распада является последовательное отщепление алкильных заместителей, далее идет фрагментация, характерная для тиоурацила **I**. Выявлены характерные отличия масс-спектров S,O-изомеров **III** от масс-спектров S,N-изомеров **II**. Так для S,O-изомеров **III** пик M⁺ имеет большую интенсивность (10-100 %), чем для S,N-изомеров **II** (2-40 %), при этом с увеличением длины алкильного заместителя интенсивность уменьшается. Характеристическим является присутствие пика иона [M-CO]⁺ в масс-спектре S,N-изомеров **II**, и отсутствие пика иона [M-RO,R,CF₃]⁺. Регистрация пиков ионов с одинаковыми значениями m/z (CHF₂⁺; CHS⁺; C₅H₃F₃N₂OS⁺; C₅H₃F₃N₂O⁺) показывает одинаковый характер распада, что подтверждает общность структур исследуемых диалкилпроизводных тиоурацила.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы УрО РАН № 18-3-3-12.