

[4-(метилсульфанил)-3,6-дигидро-1,3,5-триазин-1(2H)-ил]пропановой кислоты гидробромид. Эта реакция – первый пример аминометилирования гидрогалогенидов S-алкилизотиомочевин.

Теоретическая и практическая значимость. Полученные результаты расширяют представления об особенностях аминометилирования субстратов с мочевиным, тиомочевинным, изотиомочевинным и гуанидиновым скелетонами. Выявленная способность мочевины и тиомочевины взаимодействовать с формальдегидом и пропан-1,3-диамином с образованием трициклических макроциклов открывает пути к получению структурно подобных макроциклических систем. Изучение аминометилирования гуанидина гидрохлорида показало, что реакция не ограничивается аминометилированием одного амидинового фрагмента и, в зависимости от соотношения реактантов, приводит к бис- или трициклическим продуктам. Этот факт позволяет прогнозировать условия и маршруты подобных трехкомпонентных конденсаций в гуанидиновом ряду с целью получения би- и трициклических азотсодержащих систем с различными, в том числе функционализированными, заместителями.

Результатом исследования стало получение ряда новых производных триазина (триазинана), а также мочевиного и тиомочевинного мостиковых макроциклов. Большинство полученных соединений можно рассматривать в качестве потенциальных биологически активных веществ, что подтверждено прогнозом их биологического действия. Предложенные методы синтеза новых соединений просты и удобны для лабораторного использования, а в случае необходимости могут быть легко масштабированы в промышленном масштабе.

Методология и методы исследования. Методология органического синтеза и установления строения органических молекул. Методы синтетической органической химии. ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопия, включая двумерную спектроскопию; ИК спектроскопия, УФ спектроскопия, масс-спектрометрия высокого разрешения (МСВР), рентгеноструктурный анализ (РСА). Компьютерное (*in silico*) прогнозирование биологической активности.

Положения, выносимые на защиту:

- ✓ доказательства строения макроциклических продуктов аминометилирования мочевины и тиомочевины формальдегидом и пропан-1,3-диамином и их идентичности продуктам взаимодействия 1,3-бис(гидроксиметил)мочевины и 1,3-