

Zur Dimerisierung von Dihydro-6-styryl-2(1H)- pyrimidinonen bzw. -thionen

Über Heterocyclen, 31. Mitt.

Von

G. Zigeuner, Ch. Knopp und A. Fuchsgruber

Aus dem Institut für Pharmazeutische Chemie der Universität Graz

(Eingegangen am 9. Juli 1970)

Säuren führen Dihydro-6-styryl-2(1H)-pyrimidinone (-thione) (**1**) in Hexahydro-2(1H)-chinazolinone (-thione) (**2 b**) über. Die Struktur **2 b** wird durch Synthese gesichert.

*Dimerization of Dihydro-6-styryl-2(1H)-pyrimidinones and
-thiones*

Dihydro-6-styryl-2(1H)-pyrimidinones (-thiones) (**1**) give with acids hexahydro-2(1H)-quinazolinones (-thiones) (**2 b**). The structure **2 b** is proved by synthesis.

Dihydro-6-styryl-2(1H)-pyrimidinone bzw. -thione (**1**) unterliegen bei Einwirkung von Säuren der Dimerisierung¹. Die Dimeren wurden im Rahmen von Studien über Umsetzung von Dihydro-6-styryl-2(1H)-pyrimidinonen (-thionen) (**1**) mit α,β -ungesättigten Ketonen² als Abkömmlinge des Hexahydro-2(1H)-chinazolinons (-thions) (z. B. **2 b**)³ erkannt. Hatt⁴ erhielt aus dem Dihydro-4,4-dimethyl-6-styryl-2(1H)-pyrimidinon¹ 4 isomere Dimere und formuliert diese auf Grund von IR- und Massenspektren als Hexahydro-2(1H)-chinazolinone.

Es ist nun gelungen, die Struktur der Dimeren (**2 b**) durch Vergleich mit synthetisch gewonnenem Produkt **2 b** zu beweisen.

Das Dihydro-4-phenyl-6-styryl-2(1H)-pyrimidinthion (**1**) geht bei Behandlung mit Säuren in ein Dimeres (**2 b**)⁵ sowie in ein weiteres, noch

¹ G. Zigeuner, E. Fuchs und W. Galatik, Mh. Chem. **97**, 43 (1966).

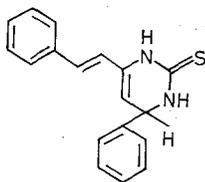
² G. Zigeuner, H. Brunetti, H. Ziegler und M. Bayer, Mh. Chem. **101**, 1767 (1970); vgl. Dissertation M. Bayer, Univ. Graz, 1966.

³ Die Formulierung **2 b** wurde erstmals in der Dissertation W. Galatik, Univ. Graz, 1966, für die Dimeren des Dihydro-4,4-dimethyl- bzw. 3,4,4-trimethyl-6-styryl-2(1H)-pyrimidinons diskutiert.

⁴ H. H. Hatt, Austral. J. Chem. **23**, 577 (1970).

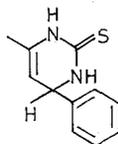
⁵ Vgl. Diss. H. Brunetti, Univ. Graz, 1961.

nicht identifiziertes Produkt über. Die als Hauptprodukt entstehende Verbindung **2 b** ist mit dem durch Synthese² erhaltenen Hexahydro-2(1*H*)-chinazolinthion **2 b** identisch. Die Synthese von **2 b** erfolgte durch Umsetzung von **1** mit dem 1,5-Diphenyl-1,4-pentadien-3-on zum 6-Cinnamoylhexahydro-4,5,7-triphenyl-2(1*H*)-chinazolinthion (**2 a**) und Kondensation von **2 a** mit Thioharnstoff im alkalischen Medium².

**1****2**

a: R = CO—CH=CH—C₆H₅

b: R =



Über die Dimerisierung von Dihydro-6-styrylpyrimidinonen (-thionen) (**1**) wird noch eingehend berichtet werden.

Experimenteller Teil

3,4,5,6,7,8-Hexahydro-4,5,7-triphenyl-6-(1,2,3,4-tetrahydro-4-phenyl-2-thiono-6-pyrimidyl)-2(1H)-chinazolinthion (2 b)

1,0 g 3,4-Dihydro-4-phenyl-6-styryl-2(1*H*)-pyrimidinthion² wird in 15 ml 70proz. Äthanol und 0,4 ml konz. HCl 15 Stdn. unter Rückfluß zum Sieden erhitzt, nach dem Erkalten eingengt und der Niederschlag abgenutscht.

Wie das Dünnschichtchromatogramm zeigt, enthält das Rohprodukt zwei Verbindungen, von welchen die Substanz **2 b** vom Schmp. 224° durch Umkristallisation aus Äthanol (Nadeln) rein erhalten werden konnte. Sie ist nach dem IR-Spektrum, dem Dünnschichtchromatogramm und dem Mischschmp. (224°) identisch mit dem aus **2 a** mit Thioharnstoff erhaltenen Produkt **2 b**² vom Schmp. 224°; Ausb. 30%.

IR-Spektrum: Breite Bande von 1670—1690 k läßt auf 2 Ring-C=C schließen.

C₃₆H₃₂N₄S₂. Ber. N 9,58, S 10,96. Gef. N 9,47, S 10,91.