

Особенности механизма превращения 5-бром-6-гидроксил-аминоурацила в 5-амино-6-нитрозо-урацил

© Садыкова Кристина Фанилевна,¹ Талипов Марат Рифкатович,^{2,*+}
Сафиуллин Рустам Лутфуллович² и Юнусов Марат Сабинович²

¹ ГОУ ВПО Башкирский государственный университет, химический факультет, кафедра биоорганической химии. Ул. З. Валиди, 32, г. Уфа, 450074. Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 273-67-01. E-mail: <http://www.bashedu.ru>, kristina-sadykova@yandex.ru

² Учреждение Российской академии наук. Институт органической химии Уфимского научного центра РАН. Ул. пр. Октября, 71, г. Уфа, 450054.
Тел.: (347) 235-60-66. E-mail: www.chem.anrb.ru, TalipovMR@anrb.ru

* Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 5-бром-6-гидроксиламиноурацил, нитрены, азиды, квантово-химические расчеты, миграция атома водорода.

Аннотация

В настоящей работе представлены результаты исследования механизма превращения 5-азидо-6-гидроксиламиноурацила в 5-амино-6-нитрозоурацил, проведенного с помощью методов ВЗЛУР и MCQDPT2//CASSCF. Показано, что распад азидной группы может протекать как фотохимическим, так и термическим путем. Доминирующее направление реакции включает себя трансформацию 5-нитрен-6-гидроксиламиноурацила в 5-имино-6-оксимурацил, характеризующуюся низким активационным барьером (1.4 кДж/моль) и высоким тепловым эффектом (-191.1 кДж/моль). Образование конечного продукта реакции может протекать через несколько альтернативных направлений, из исследованных нами каналов наиболее вероятным представляется миграция атомов водорода через метанольные мостики растворителя либо через последовательность таутомерных форм урацильного кольца.