

Протонирование 6-аминоурацила в диметилсульфоксиде

© Клецкова¹ Диана Ильинична, Нугуманов^{2*} Тимур Риммович,
Лобов² Александр Николаевич, Спирихин² Леонид Васильевич,
Файзрахманов¹⁺ Илшат Салихьянович и Иванов^{2*+} Сергей Петрович

¹ *Бакирский государственный университет. ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450076.
Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 272-63-70. E-mail: rector@bsu.bashedu.ru*

² *Уфимский институт химии УФИЦ РАН. просп. Октября, 69. г. Уфа, 450054.
Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 235-60-96. E-mail: ivanov_sp@anrb.ru*

*Ведущий направление; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 6-аминоурацил, протонирование, диметилсульфоксид.

Аннотация

Изучено взаимодействие 6-аминоурацила с хлороводородной кислотой в растворе диметилсульфоксида методами ЯМР ¹H, ¹³C, ¹⁵N спектроскопии. Установлено, что при увеличении концентрации HCl > 0.5 моль/л происходит протонирование 6-аминоурацила в ДМСО, в то время как в слабокислых водных растворах, как сообщалось ранее, этого не наблюдается. Для определения механизма протонирования были записаны спектры ЯМР исходного 6-аминоурацила и его раствора с соляной кислотой в дейтерированном ДМСО. В ¹H спектре раствора 6-аминоурацила в кислой среде максимальные изменения наблюдаются у протонов N(1) пиримидинового кольца и аминного азота. В углеродном спектре в кислой среде наибольшее смещение происходит у пятого углеродного атома (на 12 м.д. в сильное поле), а в ЯМР¹⁵N спектрах – у азотов аминной группы и N(1) пиримидинового кольца (в сильное поле на 44 и 37 м.д., соответственно), по сравнению со спектром исходного 6-аминоурацила. В статье приводятся сравнительные данные по химическим сдвигам всех атомов водорода, углерода и азота 6-аминоурацила в ДМСО и при добавлении HCl. На основании полученных экспериментальных данных можно сделать однозначный вывод о направлении протонирования в молекуле 6-аминоурацила в его сильноокислых растворах в растворе диметилсульфоксида. Таким образом, методами ЯМР ¹H, ¹³C, ¹⁵N спектроскопии показано, что в сильноокислых растворах 6-аминоурацила в ДМСО происходит его протонирование по аминогруппе шестого углеродного атома пиримидинового кольца. Предложена схема направления протонирования 6-аминоурацила в сильноокислых растворах в диметилсульфоксиде.