

Протолитические и комплексообразующие свойства производных 6-метилурацила, содержащих сульфоксидный и амидный (либо гидразидный) фрагменты

© Неклюдов¹⁺ Вадим Вячеславович, Боос¹ Галина Арведовна,
Фаттахов² Саитгарей Галяевич, Чмутова¹ Галина Алексеевна,
Шулаева² Марина Михайловна и Сальников^{1*} Юрий Иванович

¹ Химический институт им. А.М.Бутлерова. Казанский федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия. Тел: (843) 233-71-28. E-mail: sacredbox@hotmail.com

² Лаборатория химии нуклеотидных оснований. Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузова. Ул. Арбузова, 8. Казань, 420088. Республика Татарстан. Россия. Тел: (843) 279-47-09. E-mail: mshulaeva@iopc.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: противотуберкулезные препараты, производные 6-метилурацила, молекулярная механика, кислотно-основные свойства, комплексы меди(II).

Аннотация

1,3-бис[5-(Аминокарбонилметилсульфинил)пентил]-6-метилурацил и 1,3-бис[5-гидразинокрбонилметилсульфинил)пентил]-6-метилурацил синтезированы в качестве потенциальных противотуберкулезных соединений. Методами рН-метрии, спектрофотометрии и математического моделирования равновесий (программа SPESSP) изучено поведение этих веществ в водно-ДМСО растворе (60 об. % ДМСО). Охарактеризованы их протолитические свойства. Определен состав и вычислены константы устойчивости комплексов с медью(II). Получены оценочные данные о строении различных форм соединений и комплексов с помощью метода молекулярной механики MM2, программный пакет ChemBioOffice (Version 12.0).