

## Протонирование 6-аминоурацила в диметилсульфоксиде

© Клецкова<sup>1</sup> Диана Ильинична, Нугуманов<sup>2\*</sup> Тимур Риммович,  
Лобов<sup>2</sup> Александр Николаевич, Спирихин<sup>2</sup> Леонид Васильевич,  
Файзрахманов<sup>1+</sup> Илшат Салихьянович и Иванов<sup>2\*+</sup> Сергей Петрович

<sup>1</sup>Башкирский государственный университет. ул. З. Валиди, 32. г. Уфа, 450076.

Республика Башкортостан. Россия. Тел.: (347) 272-63-70. E-mail: [rector@bsu.bashedu.ru](mailto:rector@bsu.bashedu.ru)

<sup>2</sup>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](mailto: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 <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N 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 <sup>1</sup>H 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 ЯМР<sup>15</sup>N 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 <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>15</sup>N 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.