**Первый синтез 5-изотиоцината 6-метилурацила**

***Валеева А.А.1, Черникова И.Б.2, Юнусов М.С.2***

*Студент, 1 курса магистратуры*

*1Уфимский университет науки и технологий, Стерлитамакский филиал,*

*химический факультет, Стерлитамак, Россия*

*2Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия  
E-mail:* [*chernikovaib@anrb.ru*](mailto:chernikovaib@anrb.ru)

# Урацил является важнейшим компонентом нуклеиновых кислот [1]. Помимо этого, многие из производных урацила, используются в медицинской практике в качестве препаратов c доказанной эффективностью, в том числе при лечении SARS-CoV-2 (COVID-19) [2]. Также, особое внимание химиков-синтетиков уделяется исследованию гибридных структур, содержащих 2 и более фармакофорные группы. Таким образом, модификация урацила перспективна в плане получения ксенобиотиков, способных вовлекаться в синтез РНК или нарушая пиримидиновый обмен влиять на активность ферментов, участвующих в синтезе нуклеиновых кислот.

Ранее нами было показано, что хлорангидрид гидроксимовой кислоты (**1**) (Схема 1) в присутствии Et3N превращается в *N*-окись нитрила, которая вступает в реакцию с аминами, спиртами и непредельными соединениями [3-4]. В ходе дальнейшей работы мы обнаружили необычное взаимодействие хлорангидрида гидроксимовой кислоты **1** с аллилтиомочевиной.

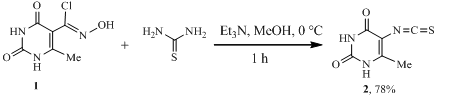


Схема 1. Синтез 5-изотиоцианат-6-метилурацила **2**

Данные элементного анализа **3** соответствуют брутто-формуле C6H5N3O2S, что подтверждается наличием в масс-спектре отрицательных ионов пика иона максимальной интенсивности с m/z 182.0022, обусловленного ионом [М-1]¯ состава C6H4N3O2S. В спектрах ЯМР 1Н и 13С продукта имеются все сигналы С6-метилурацильного фрагмента. Учитывая элементный состав продукта и наличия в нем 6-метилурацила, остается фрагмент состава NCS, что может соответствовать либо изотиоцианатной, либо тиоцианатной группе.

Структура соединения **2** и отнесения сигналов ЯМР 1H, 13C и 15N были установлены с использованием двумерных корреляционных спектров {1H, 13C} и {1H, 15N} HSQC и HMBC в растворе ДМОС-*d6*. Положение всех углеродных сигналов 6-метил урацильного ядра установлено на основании {1H, 13C} HMBC кросс-пиков. Положение сигнала при δC 144.94 м.д. в заместителе при С5 и его слабая, за счет квадрупольного уширения на 14N, интенсивность, указывает на изотиоцианатную группу. Полученные нами результаты подтверждают наличие в соединении **2** изотиоцианатной группы.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России по теме № 122031400260-7.*

**Литература**

1. Krokan H.E., Drablоs F., Slupphaug G. Uracil in DNA--occurrence, consequences and repai // Oncogene. 2002. Vol. 21. P. 8935-8948.

2. Pagliano P., Sellitto C., Ascione T., Scarpati G., Folliero V., Piazza O., Franci G., Filippelli A., Conti V. The preclinical discovery and development of molnupiravir for the treatment of SARS-CoV-2 (COVID-19). // Expert Opin. Drug Discov. 2022, Vol. 17. P. 1299-1311.

3. Черникова И.Б., Хурсан С.Л., Спирихин Л.В., Юнусов М.С. Химические свойства 5-карбальдоксим-6-метилурацила. // Журн. Орг. Хим. 2019. Т. 55. С. 1367-1375.

4. Черникова И.Б., Юнусов М.С., Лобов А.Н. Синтез 2-изоксазолинов и изоксазола, содержащих фрагменты урацила. // Журн. Орг. Хим., 2023. Т. 59. С. 824-828.