

Цель и методическая часть работы Производные 2-меркапто-4-окси-6-метилпиримидина широко используются, как соединения с медико-биологической активностью. Разработка методов синтеза подобных соединений является актуальной задачей [1-8]. Для изучения реакционной способности 2-меркапто-4-окси-6-метилпиримидина нами методом AB INITIO (ограниченный Хартри-Фокка базис 6-31G**) изучено геометрическое и электронное строение S- и O-анионов, которые могут из него образовываться [1,8-12]. Результаты расчётов Результаты квантово-химических расчётов (геометрическое и электронное строение оптимизированных структур тиааниона и оксианиона, распределение зарядов на атомах представлены на рис. 1-2. Полная энергия оксианиона выше, чем тиааниона на 55.9 кДж/моль. В связи с этим образование его при прочих равных условиях маловероятно. Это подтверждается экспериментально кинетическими исследованиями и синтезом исключительно S-монопроизводных при генерировании тиааниона в водно-диоксановых средах при температуре 30 - 50 0C [1-8]. Рис. 1 - Геометрическое и электронное строение тиааниона Рис. 2 - Геометрическое и электронное строение оксианиона

Заключение Таким образом, нами впервые был выполнен квантово-химический расчёт тиа- и оксоанионов, полученных из 2-меркапто-4-окси-6-метилпиримидина методом AB INITIO в базисе 6-31G**. Получены их оптимизированные геометрические и электронные строения. Показано, что образование оксианиона энергетически выгоднее тиааниона на 55.9 кДж/моль. Этот же факт подтверждён экспериментально кинетическими исследованиями и синтезом S-монопроизводных.