

# AB INITIO МОДЕЛИРАНЕ НА МЕХАНИЗМИ НА ПРЕБИОТИЧНИ РЕАКЦИИ: ОТ ФОРМАМИД ДО ХИПОКСАНТИН

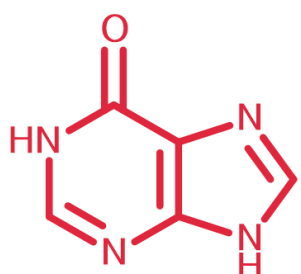
2020

С. Славова\*, В. Енчев

Българска академия на науките, Институт по обща и неорганична химия, ул. Акад. Георги Бончев, бл. 11, 1113 София, БЪЛГАРИЯ

\* E-mail : st013629@student.spbu.ru

## Въведение



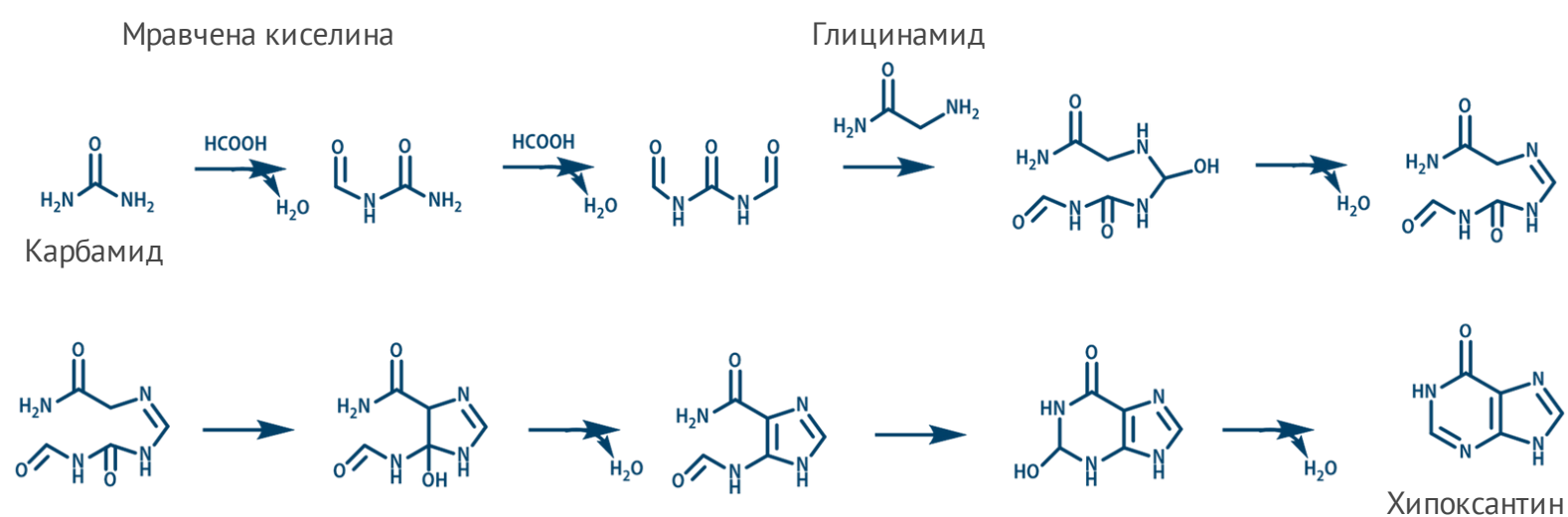
Нуклеобаза хипоксантин е включена в нуклеозида инозин, който обикновено се намира в тРНК и е от съществено значение за правилното превеждане на генетичния код.

**Цел** на изследване е намиране на реакционния път и механизмите на реакции за получаване на хипоксантин от карбамид, мравчена киселина и глицинамид в среда на формамид.

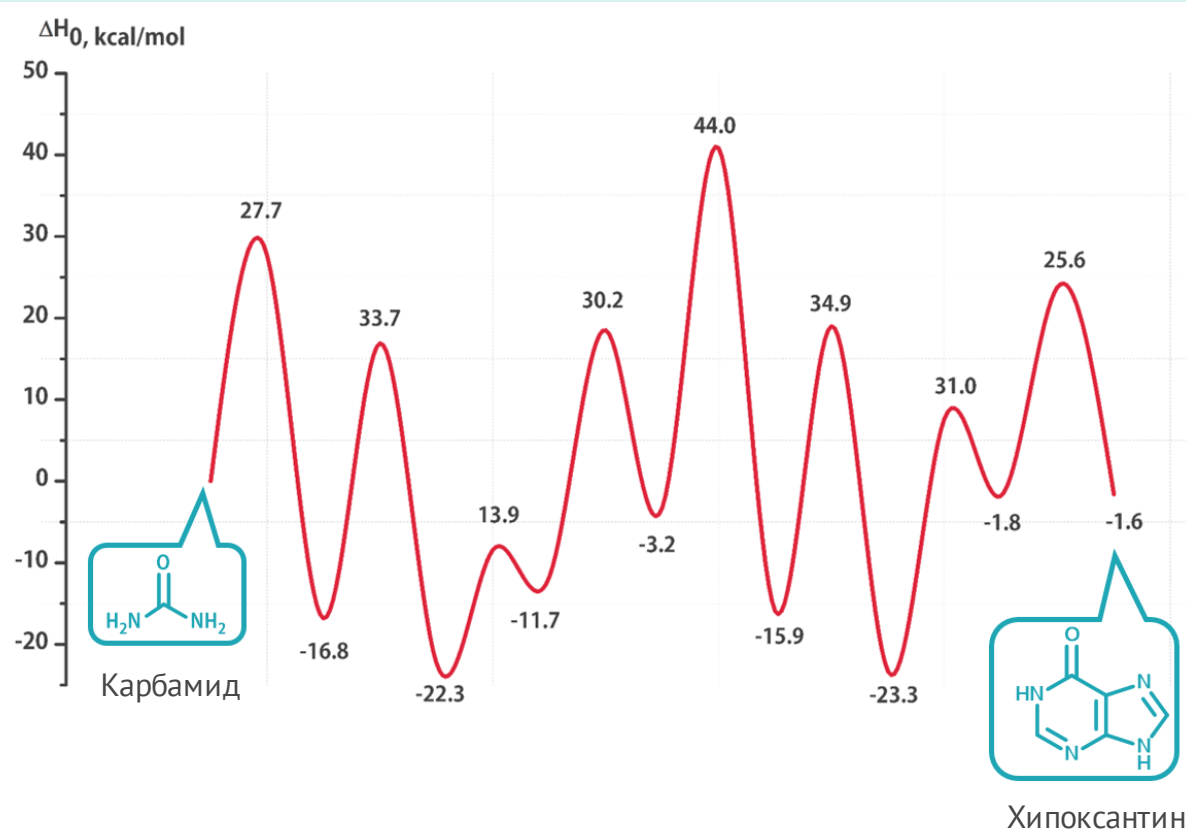
## Методи

MP2 **GAMESS** SMD  
SCS-MP2 cc-PVDZ

## Резултати



Реакционни пътища от карбамид, мравчена киселина и глицинамид до хипоксантин.



Профил на потенциална енергия на реакционен път от карбамид до хипоксантин.

## Изводи

Хипоксантин се получава по механизъм при който първо се образува имидазолов пръстен, а след това пиримидинов.

## Благодарности

Работа е подкрепена от МОН чрез Национална Програма „Млади Учени и Постдокторанти“, одобрена от DCM # 577/17.08.2018.