

УДК 543.42:547.82

**ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ НА СТРУКТУРУ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ  
КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ПАР ОСНОВАНИЙ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ.  
II. АДЕНИН—ТИМИН**© 2010 Г.Н. Тен<sup>1\*</sup>, В.В. Нечаев<sup>1</sup>, А.Н. Панкратов<sup>1</sup>, В.И. Березин<sup>1</sup>, В.И. Баранов<sup>2</sup><sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского<sup>2</sup>Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва

Статья поступила 5 ноября 2009 г.

Проведен расчет и анализ колебательных спектров изолированной комплементарной пары аденин—тимин в приближении  $B3LYP/6-311++G(d,p)$ . Показано влияние водородных связей на структуру, положение частот и значение интенсивностей нормальных колебаний пары по сравнению со спектрами изолированных молекул тимина и аденина. Выполнен сравнительный анализ влияния водородных связей на ИК и КР спектры тимина и аденина.

**Ключевые слова:** аденин, тимин, комплементарная пара, колебательные спектры, водородная связь, интерпретация.

**ВВЕДЕНИЕ**

Анализ колебательных спектров в разных фазовых состояниях является одним из эффективных методов исследования структуры вещества, в том числе определения таутомерного состава, знание которого имеет первостепенное значение при решении ряда фундаментальных и прикладных задач биохимии, медицины и молекулярной биологии, рассматривающих спонтанное возникновение мутаций как результат таутомерии оснований нуклеиновых кислот (ОНК).

Цель данной работы — проанализировать и сравнить влияние водородных связей на ИК и КР спектры изолированных молекул аденина (Ade) и тимина (Thy) при их объединении в комплементарную пару Ade—Thy. Для этого необходимо выполнить интерпретацию колебательных спектров, определить вклад водородных связей в распределение потенциальной энергии (РПЭ) каждого нормального колебания пары, рассмотреть влияние каждой из двух водородных связей на величины смещения частот и интенсивностей полос поглощения и линий КР, выяснить особенности влияния водородных связей на ИК и КР спектры рассматриваемых соединений.

Расчет структуры и колебательных спектров изолированных молекул Thy, Ade и комплементарной пары Ade—Thy выполнен методом DFT с помощью программ Gaussian-03 [1]. Гармонические колебания рассчитывались в приближении  $B3LYP/6-311++G(d,p)$ , показавшем свою высокую эффективность при расчете колебательных спектров с учетом водородных связей [2, 3]. Лучшее согласие с экспериментом можно достичь лишь при решении задачи в ангармоническом приближении [4—7].

Результаты данного исследования могут быть использованы в дальнейшем для анализа спектрального проявления взаимного влияния водородных связей в комплементарных парах ОНК, установленного ранее для целого ряда комплексных соединений [8], а также для определения таутомерного состава ОНК в разных фазовых состояниях [9—23].

\* E-mail: TenGN@info.sgu.ru

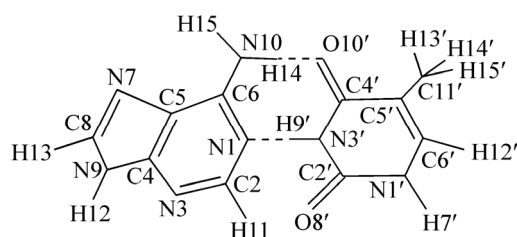


Рис. 1. Молекулярная диаграмма комплементарной пары Ade—Thy с нумерацией атомов

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Молекулярная диаграмма комплементарной пары Ade—Thy с нумерацией атомов дана на рис. 1. Длины связей Ade—Thy практически не отличаются от длин связей изолированных Ade и Thy в отличие от углов, которые претерпевают характерные изменения в области образования водородных связей (табл. 1). Молекула Thy "вытягивается" в сторону образования водородной связи  $N'_3H'_9 \dots N_1$ , а именно: угол  $C'_2N'_3C'_4$  уменьшается, а углы  $N'_1C'_2N'_3$  и  $N'_3C'_4C'_5$  увеличиваются на  $\sim 1\text{--}1,5^\circ$ . Для Ade аналогичное "вытягивание" наблюдается в направлении аминной группы, участвующей в образовании водородной связи  $O'_{10} \dots H_{14}N_{10}$ . При этом угол  $N_1C_6C_5$  уменьшается, а углы  $C_4C_5C_6$  и  $C_2N_1C_6$  увеличиваются, как и в случае Thy, на  $\sim 0,5\text{--}1^\circ$ . Кроме того, на  $1,54^\circ$  увеличивается угол  $C_6N_{10}H_{14}$ . Такие геометрические изменения приводят к тому, что длины водородных связей  $H'_9 \dots N_1$  и  $O'_{10} \dots H_{14}$  в паре Ade—Thy не меняются по сравнению с соответствующими длинами в паре аденин—урацил (Ade—Ura) и остаются равными 1,84 и 1,93 Å соответственно [24].

Значения вычисленных в гармоническом приближении и экспериментальных частот и интенсивностей ИК и КР спектров изолированного Thy, а также комплементарной пары Ade—Thy приведены в табл. 2. (Для Ade анализ результатов расчета и сравнение с экспериментом выполнены в [24] при рассмотрении колебательного спектра пары Ade—Ura). Поскольку колебания пары соответствуют колебаниям Ade или Thy, то при интерпретации спектра комплементарной пары была использована нумерация колебаний изолированных Thy и Ade.

Согласно выполненному расчету, вклад водородных связей в РПЭ колебаний комплементарной пары Ade—Thy имеет место для 44 плоских колебаний из 54 — из них 23 и 21 колебания Ade и Thy соответственно. Одновременное влияние обеих водородных связей испытывает 21 колебание; под влияние только водородной связи  $O'_{10} \dots H_{14}N_{10}$  попадают 4, а  $N'_3H'_9 \dots N_1$  — 18 колебаний. Наиболее существенный вклад водородной связи  $O'_{10} \dots H_{14}N_{10}$  в РПЭ пары наблюдается для колебаний  $4a+4t$ ,  $6t$ ,  $7a$ ,  $8a$ ,  $11t$ ,  $37a$ ,  $39a$ , а связи  $N'_3H'_9 \dots N_1$  — для колебаний  $6t$ ,  $8a$ ,  $9t$ ,  $11a$ ,  $12t$ ,  $17a$ ,  $20a$ ,  $38t$ . Для неплоских колебаний выхода связи  $N_{10}H_{14}$  аминной группы Ade (колебание  $9a$ ) и связи  $N'_3H'_9$  Thy (колебание  $12t$ ), участвующих в образовании водородных связей, как и в случае пары Ade—Ura, наблюдается смещение в область более высоких частот на  $200\text{--}300\text{ см}^{-1}$ .

Т а б л и ц а 1

Рассчитанные изменения углов ( $\Delta\alpha = \alpha(\text{Ade/Thy}) - \alpha(\text{Ade—Thy})$ , град.) в Thy и Ade при образовании пары Ade—Thy

Thy				Ade							
Угол	$\Delta\alpha$	Угол	$\Delta\alpha$	Угол	$\Delta\alpha$	Угол	$\Delta\alpha$	Угол	$\Delta\alpha$	Угол	$\Delta\alpha$
$N'_1C'_2N'_3$	-0,74	$C'_2N'_3H'_9$	-0,39	$N_1C_2N_3$	0,47	$C_4C_5N_7$	0	$N_1C_6N_{10}$	-0,63	$C_8N_9H_{12}$	-0,06
$C'_2N'_3C'_4$	1,16	$N'_3C'_4O'_{10}$	-0,22	$C_2N_3C_4$	-0,02	$C_5N_7C_8$	-0,05	$N_1C_2H_{11}$	0,40	$C_4N_9H_{12}$	0,06
$N'_3C'_4C'_5$	-1,44	$C'_4C'_5H'_{11}$	-0,47	$N_3C_4C_5$	-0,24	$N_7C_8N_9$	0,10	$N_3C_2H_{11}$	-0,87	$C_6N_{10}H_{15}$	1,48
$C'_4C'_5C'_6$	0,44	$N'_1C'_6H'_{12}$	-0,29	$C_4C_5C_6$	-0,51	$C_8N_9C_4$	-0,01	$N_7C_8H_{13}$	-0,06	$C_6N_{10}H_{14}$	-1,54
$N'_1C'_6C'_5$	0,38	$C'_2N'_1H'_7$	-0,05	$N_1C_6C_5$	1,26	$C_5C_4N_9$	-0,05	$N_9C_8H_{13}$	-0,05		
$C'_2N'_1C'_6$	0,20	$N'_1C'_2O'_8$	0,85	$C_2N_1C_6$	-0,96	$C_5C_6N_{10}$	-0,63				

Т а б л и ц а 2

Экспериментальные [ 11 ] и вычисленные значения частот ( $\nu_3, \nu_p, \text{см}^{-1}$ ) и интенсивностей спектров ИК ( $I_{p, \text{ИК}}, \text{км/моль}$ ) и КР ( $I_{3, \text{КР}}, I_{p, \text{КР}}, \text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$ ) Thy, Ade и комплементарной пары Ade—Thy

Thy							Ade					Ade—Thy				РПЭ*	
№	$\nu_3$	$I_{3, \text{КР}}$	$\nu_p$	$I_{p, \text{КР}}$	$I_{p, \text{ИК}}$	Отнесение	№	$\nu_p$	$I_{p, \text{КР}}$	$I_{p, \text{ИК}}$	Отнесение	№	$\nu_p$	$I_{p, \text{КР}}$	$I_{p, \text{ИК}}$	A**	B**
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
													23	0,7	6,6		
													30	0,9	0		
													56	4,5	3,9	24	24
													64	0,9	0,6		
													102	0,3	0,4	15	9
													104	1,6	0,8	28	24

## Неплоские колебания

1t			107	0,2	0	$\chi(\text{C}'\text{H}'_3), \chi$	1a	26	—	192,1	$\chi(\text{NH}_2)$	1t	108	0,3	0,6		
2t			144	0,3	1,0	$\chi(\text{C}'\text{H}'_3), \chi$						2t	148	0,6	0,1		
3t	155	0,1	147	0,2	0,1	$\chi(\text{C}'\text{H}'_3), \chi$	2a	163	0,1	27,1	$\chi(\text{p+i}), \chi(\text{NH}_2)$	3t+2a	154	0,1	0		
												2a+3t	163	0,2	0,8		
5t	307	0,6	292	0,2	0,2	$\chi(\text{C}'\text{H}'_3), \chi$	3a	216	0,1	0,5	$\chi(\text{p+i})$	3a	223	0,0	1,9		
												5t	286	0,3	0,5		
7t	391	—	394	0,9	20,5	$\chi$	5a	298	—	0,9	$\chi(\text{p+i})$	5a	298	—	0		
												7t+1a	393	0,9	45,4		
												1a+7t	414	0,6	122,9		
10t	551	—	554	0,1	56,9	$\rho(\text{N}'_1\text{H}'_7)$	6a	515	0,9	74,2	$\rho(\text{N}_9\text{H}_{12})$	6a	520	0,9	71,5		
							9a	539	0,1	2,4	$\rho(\text{NH}_2)$						
12t	662	0	667	0,9	85,7	$\rho(\text{N}'_3\text{H}'_9)$	10a	574	0,7	52,1	$\chi(\text{p+i})$	10t	558	0,1	83,7		
												10a	576	0,3	40,4		
14t	754	0	753	0	43,3	$\rho(\text{C}'_2\text{O}'_8)$											
15t	763	2	766	1,1	14,1	$\rho(\text{C}'_4\text{O}'_{10})$											
17t	889	1	907	1,2	17,6	$\rho(\text{C}'_6\text{H}'_{12})$	15a	808	0,6	11,1	$\chi(\text{p+i})$	15a	803	0,6	6,4		
							16a	847	0,5	8,2	$\rho(\text{C}_8\text{H}_{13})$	16a	842	0,7	9,3		
20t	1046	1	1068	1,8	1,1	$\rho(\text{C}'\text{H}'_3)$	19a	975	0,1	3,8	$\rho(\text{C}_2\text{H}_{11})$	19a+12t	986	—	65,2		
28t	1455	4	1471	7,8	8,1	$\rho(\text{C}'\text{H}'_3)$						19a+12t	995	0,2	11,3		
												20t	1066	0,1	1,8		
												28t	1470	9,5	7,9		

## Плоские колебания

4t	282	0,5	279	0,2	2,7	$\beta(\text{C}'_5\text{C}'_{11})$	4a	277	3,0	11,1	$\beta(\text{C}_6\text{N}_{10})$	4t+4a	287	—	1,2	6	3
												4a+4t	312	8,4	38,5	21	1
6t	407	—	389	1,2	19,5	$\beta(\text{C}'_2\text{O}'_8), \beta(\text{C}'_4\text{O}'_{10})$						6t	406	1,4	63,0	11	8
8t	455	4	461	5,2	19,1	$\gamma$						8t	471	5,1	17,9	4	1
							7a	520	2,8	4,5	$\gamma$	7a	532	7,8	4,5	6	2
							8a	532	3,2	1,8	$\gamma$	8a	537	2,3	3,1	5	7
9t	540	3	546	4,7	7,7	$\gamma$						9t	552	3,9	34,2	1	9
11t	601	7	607	5,3	1,3	$\gamma$						11t	615	3,5	10,8	8	4
							11a	619	7,3	0,7	$\gamma$	11a	636	5,6	7,9	1	8

## Продолжение табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
							14a	725	25,3	2,4	Q(CC), Q(CN)	14a	726	27,1	2,5	2	2
13t	727	12	733	15,4	5,3	Q(C'C'), Q(C'N')						13t	745	24,0	29,2	3	9
16t	799	5	803	4,9	4,9	γ						16t	808	4,7	8,1	3	2
							17a	900	1,8	12,2	γ	17a	911	2,1	8,3	1	7
							18a	944	4,2	14,5	γ	18a	947	5,1	16,5		3
18t	959	3	965	5,1	13,8	Q, γ						18t	983	8,4	20,5		2
19t	1004	3	1024	3,9	2,1	β(C'H <sub>3</sub> )						19t	1024	3,2	15,2		3
							20a	1008	5,0	4,7	Q, β(NH <sub>2</sub> )	20a	1038	11,2	20,6		5
							21a	1079	8,4	21,1	Q, β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> ), β(C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> )	21a	1078	9,6	22,4		
							22a	1143	2,5	23,2	Q, β(C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> ), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> ), γ	22a	1149	2,1	16,5	1	1
21t	1139	3	1149	3,3	7,7	Q, β(C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> ), β(N <sub>1</sub> H <sub>7</sub> )						21t	1172	3,2	12,3	1	3
22t	1183	1	1197	0,4	141,5	Q, β(C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> ), β(N <sub>1</sub> H <sub>7</sub> )						22t	1222	2,3	90,5		2
23t	1220	6	1223	2,8	23,7	Q(C <sub>5</sub> C <sub>11</sub> )						23t	1222	5,5	45,2		1
							23a	1242	15,5	14,9	Q(CN), β(NH <sub>2</sub> )	23a	1258	32,8	35,4	1	2
							24a	1267	16,7	27,1	Q(CN), β(C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> ), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> )	24a	1266	5,9	21,2	1	1
							25a	1327	17,8	75,4	Q(CC,CN), β(C <sub>2</sub> H <sub>11</sub> )	25a	1337	32,4	105,3		
							26a	1356	47,4	40,8	Q(CC,CN), β(C <sub>2</sub> H <sub>11</sub> ), β(C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> )	26a	1352	72,1	39,1		
24t	1357	31	1371	27,9	11,8	Q, β(C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> )						24t	1370	42,8	11,8		1
							27a	1364	38,3	25,6	Q(CC,CN), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> ), β(C <sub>2</sub> H <sub>11</sub> )	27a	1371	33,0	16,3		1
25t	1388	5	1409	2,0	19,9	Q, β(N <sub>3</sub> H <sub>9</sub> )						28a	1414	29,9	14,8		1
							28a	1415	27,1	14,1	Q(CC,CN), β(C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> ), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> )	28a	1414	29,9	14,8		1
26t	1405	1	1417	4,5	102,1	Q(C <sub>4</sub> C <sub>3</sub> ), β(N <sub>1</sub> H <sub>7</sub> )						26t	1422	13,5	89,2		2
27t	1431	7	1425	7,6	3,4	β(C'H <sub>3</sub> )						27t	1424	3,9	36,2		1
							29a	1433	0,6	20,4	Q(C <sub>4</sub> N <sub>10</sub> ), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> )	29a	1443	0,3	10,1	1	1
29t	1472	16	1492	5,9	20,3	Q(N <sub>1</sub> C <sub>6</sub> ), β(N <sub>1</sub> H <sub>7</sub> )						29t	1492	5,2	14,5		
30t	1510	–	1499	24,2	58,6	β(C'H <sub>3</sub> )	30a	1501	13,8	85,3	Q(CN), β(C <sub>2</sub> H <sub>11</sub> ), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> )	30t+30a	1502	14,1	49,6		
							31a	1513	76,5	8,2	Q(CN, p+i), β(C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> )	30a+30t	1509	66,8	108,9		1
												31a	1519	53,1	13,6		1
							32a	1608	4,6	14,2	Q(CN), β(C <sub>2</sub> H <sub>11</sub> )	25t	1541	18,4	72,6	1	1
							33a	1634	21,9	118,6	Q(CC,CN), β(N <sub>9</sub> H <sub>12</sub> )	32a	1622	15,1	28,6	2	
												33a	1636	9,7	300,9	1	1

Окончание табл. 2

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
							34a	1657	9,2	654,3	$\beta(\text{NH}_2)$	34a	1682	8,3	386,7	4	
31t	1668	32	1696	42,8	48,2	$Q(\text{C}'_5=\text{C}'_6)$						31t	1691	25,8	6,7	1	
32t	1711	46	1752	49,4	653,6	$Q(\text{C}'_4=\text{O}')$						32t	1722	98,7	513,1	2	1
33t	1767	12	1799	24,2	808,2	$Q(\text{C}'_2=\text{O}')$						33t	1792	16,2	740,9		1
34t	2969	55	3034	215,7	21,7	$q(\text{C}'\text{H}'_3)$						34t	3032	206,8	16,0		3
35t	2939	162	3086	83,7	9,9	$Q(\text{C}'\text{H}'_3)$						35t	3084	79,2	11,0		
36t	2997	42	3109	68,5	14,6	$q(\text{C}'\text{H}'_3)$						36t	3106	77,2	16,6		
							35a	3167	136,8	18,2	$q(\text{C}_2\text{H}_{11})$	35a	3172	79,7	2,6		2
37t	3078	77	3194	102,9	5,1	$q(\text{C}'_6\text{H}'_{12})$						37t	3191	142,3	6,7		
							36a	3239	120,7	0,2	$q(\text{C}_8\text{H}_{13})$	36a	3239	143,4	0,1		2
38t	3432	—	3597	81,2	66,7	$q(\text{N}'_3\text{H}'_9)$						38t	3001	642,8	2100,4		36
							37a	3609	174,9	102,9	$q(\text{NH}_2)$ sim	37a	3407	348,1	1056,6	35	2
39t	3479	—	3639	106,7	104,3	$q(\text{N}'_1\text{H}'_7)$						39t	3638	128,1	104,2		
							38a	3649	145,6	85,6	$q(\text{N}_9\text{H}_{12})$	38a	3648	167,4	92,3		
							39a	3742	45,7	65,4	$q(\text{NH}_2)$ asim	39a	3684	53,2	132,4	12	

\* Вклады водородных связей в РПЭ, %.

\*\* А — водородная связь  $\text{O}'_{10}\dots\text{H}_{14}\text{N}_{10}$ ; В — водородная связь  $\text{N}'_3\text{H}'_9\dots\text{N}_1$ .

Сравнение интенсивностей КР и ИК спектров ОНК и пары в области  $300\text{—}1000\text{ см}^{-1}$  показывает, что спектры КР Thy и Ade практически не претерпевают каких-либо существенных изменений при образовании комплементарной пары в отличие от ИК спектров, существенные изменения в которых происходят благодаря проявлению в них неплоских колебаний связей, участвующих в образовании водородных связей  $\text{O}'_{10}\dots\text{H}_{14}\text{N}_{10}$  и  $\text{N}'_3\text{H}'_9\dots\text{N}_1$  (рис. 2, 3).

В области  $1000\text{—}1800\text{ см}^{-1}$  частоты колебаний изолированных молекул Thy и Ade, формы которых содержат изменения внешних углов при атомах  $\text{N}'_1$ ,  $\text{C}'_5$ ,  $\text{C}'_6$ ,  $\text{N}_9$ ,  $\text{C}_2$ ,  $\text{C}_8$ , не участвующих в образовании водородных связей, при образовании комплементарной пары смещаются в основном на  $5\text{—}10\text{ см}^{-1}$ . Исключением являются колебания 20a и 34a, формы которых содержат изменения углов аминной группы  $\text{NH}_2$  Ade, а также колебания 21t и 25t, формы которых содержат изменения внешних углов связи  $\text{N}'_3\text{H}'_9$  Thy — под влиянием водородных связей происходит повышение частот этих колебаний в паре Ade—Thy. Особенно велико смещение частоты для колебания 25t, составляющее  $153\text{ см}^{-1}$ .

Интенсивность линий КР в области  $1200\text{—}1620\text{ см}^{-1}$  на порядок выше интенсивности линий в низкочастотной области, поэтому влияние водородных связей на спектр визуально кажется более сильным, хотя в обеих областях в результате этого влияния величина интенсивности при образовании комплементарной пары меняется в 2—3 раза. Например, изменение интенсивности линий КР Ade в области  $1240\text{—}1360\text{ см}^{-1}$  (колебания 23a—26a) и изменение интенсивности линий КР Thy в области  $1350\text{—}1550\text{ см}^{-1}$  (колебания 24t, 25t, 30t) приводит к значительному изменению спектров КР Ade и Thy при образовании пары Ade—Thy (см. рис. 2 и 3).

Степень отличия колебательных спектров отдельных ОНК и комплементарной пары в области  $1000\text{—}1800\text{ см}^{-1}$  зависит от того, какие молекулярные фрагменты принимают участие в образовании водородных связей. Для Thy значительные частотные смещения колебаний связей  $\text{N}'_3\text{H}'_9$  и  $\text{C}'_4=\text{O}'_{10}$  приводят к сильному отличию спектров ИК и КР от аналогичных спектров Thy в паре. Напротив, в случае Ade, для которого частотные смещения деформационных колебаний аминной группы при образовании комплементарной пары составляют не более  $25\text{ см}^{-1}$ , значительные отличия наблюдаются только в спектрах КР, а на спектрах ИК, напротив, влияние водородных связей практически не сказывается.

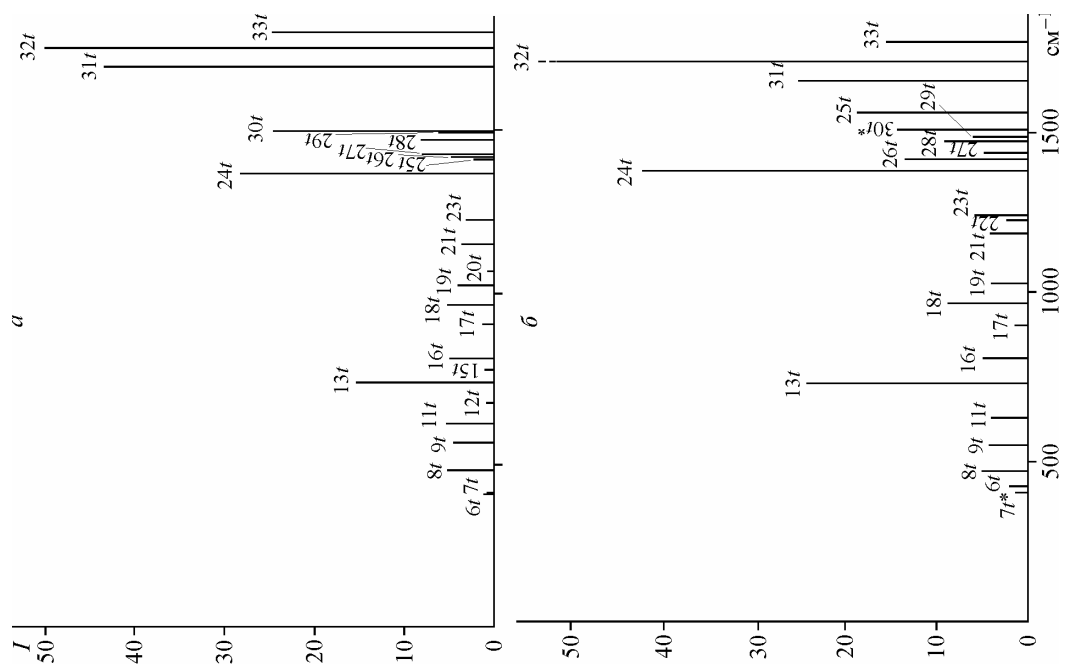


Рис. 2. Вычисленные КР спектры Thy — изолированного (а) и в паре Ade—Thy (б)

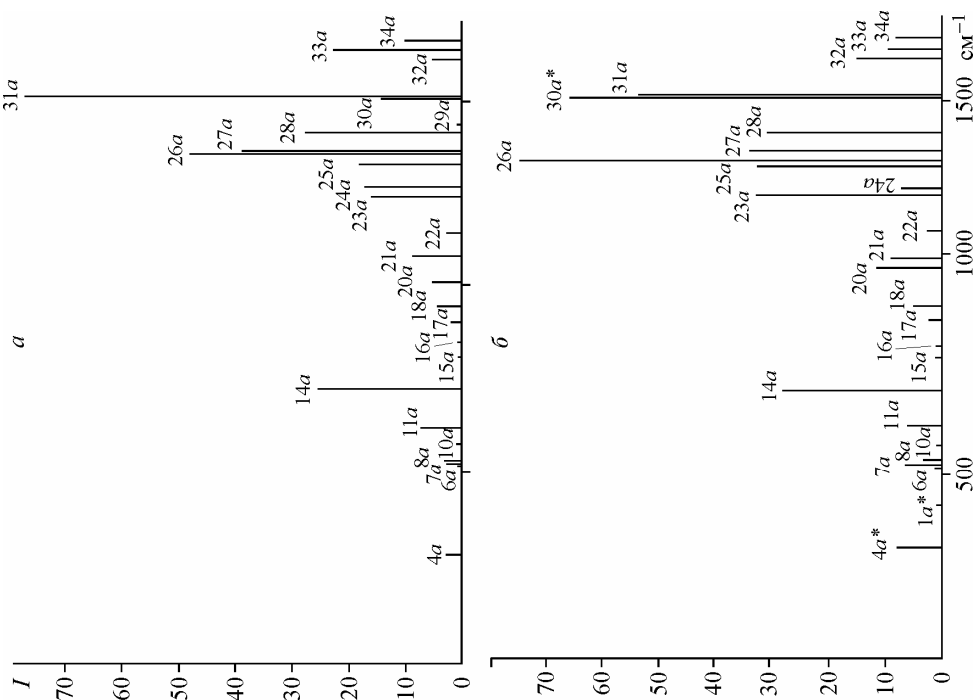


Рис. 3. Вычисленные КР спектры Ade — изолированного (а) и в паре Ade—Thy (б)

## ВЫВОДЫ

Проведенный анализ позволил выявить следующие наиболее важные особенности влияния водородных связей на колебательные спектры комплементарной пары Ade—Thy.

Показано, что при образовании комплементарной пары Ade—Thy частоты валентных колебаний аминной группы  $\text{NH}_2$  и связи  $\text{N}'_3\text{H}'_9$ , а также внешних деформационных углов при этих связях смещаются в область более высоких частот на  $50\text{—}150\text{ см}^{-1}$ ; смещения частот неплоских колебаний  $\rho(\text{N}'_3\text{H}'_9)$  и  $\rho(\text{N}_{10}\text{H}_{14})$  составляют  $200\text{—}300\text{ см}^{-1}$ . Эти смещения приводят к смешению четырех колебаний Thy и Ade в колебательном спектре Ade—Thy; остальные колебания пары являются суперпозицией колебаний Ade и Thy.

В низкочастотной области спектров КР неплоские колебания связей, участвующие в образовании водородных связей, не проявляются, что приводит к очень схожим спектрам КР Ade и Thy в изолированном состоянии и в паре Ade—Thy. Это позволяет использовать интерпретацию спектров КР, выполненную для изолированных состояний, для отнесения спектров в конденсированных состояниях.

В высокочастотной области ( $1000\text{—}1800\text{ см}^{-1}$ ) наблюдаются существенные отличия спектров КР и ИК отдельных Ade и Thy и в комплементарной паре. Степень различия спектров определяется характером структурных фрагментов, принимающих участие в образовании водородных связей. Как следствие, если для Thy образование водородных связей значительно сказывается на спектрах обоих типов (ИК и КР), то для Ade — только на спектрах КР.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2003.
2. Del Bene J.E., Person W.B., Azczepaniak K. // J. Phys. Chem. – 1995. – **99**. – P. 10705.
3. Bencivenni L., Ramondo F., Pieretti A., Sanna N. // J. Chem. Soc., Perkin Trans. – 2000. – **2**. – P. 1685.
4. Грибов Л.А., Павлючко А.И. Вариационные методы решения ангармонических задач в теории колебательных спектров молекул. – М.: Наука, 1998.
5. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В., Вигасин А.А. // Хим. физика. – 1992. – **11**. – С. 608.
6. Элькин П.М., Эрман М.А., Пулин О.В. // Журн. прикл. спектроскоп. – 2006. – **73**. – С. 431.
7. Краснощеков С.В., Степанов Н.Ф. // Журн. физ. химии. – 2008. – **82**. – С. 1.
8. Тараканова Е.Г., Юхневич Г.В. // Журн. структур. химии. – 2005. – **46**. – С. 26.
9. Жижина Г.П., Олейник Э.Ф. // Успехи химии. – 1972. – **41**. – С. 474.
10. Lagant P., Vergoten G., Derreumaux P., Dhennin R. // J. Raman. Spectroscop. – 1990. – **21**. – P. 215.
11. Small E.W., Peticolas W.L. // Biopolymers. – 2004. – **10**. – P. 1377.
12. Lee C., Park K.-H., Cho M. // J. Chem. Phys. – 2006. – **125**. – P. 114508.
13. Krishnan G.M., Kühn O. // Chem. Phys. Lett. – 2007. – **435**. – P. 132.
14. Wiorcikiewicz-Kuczera J., Karplus M. // J. Amer. Chem. Soc. – 1990. – **112**. – P. 5324.
15. Hroudá V.V., Florián J., Hobza P. // J. Phys. Chem. – 1993. – **97**. – P. 1542.
16. Florián J., Leszczyński J. // Intern. J. Quantum Chem.: Quantum Biology Symposium. – 1995. – **22**. – P. 207.
17. Santamaria R., Charro E., Zacarias A., Castro M. // J. Comput. Chem. – 1999. – **20**. – P. 511.
18. Villani G. // Chem. Phys. – 2005. – **316**. – P. 1.
19. Szczepaniak K., Szczesniak M.M., Person W.B. // J. Phys. Chem. – 2000. – **104A**. – P. 3852.
20. Пиментелл Дж., Мак-Клеллан О. Водородная связь. – М.: Мир, 1964.
21. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – М.: Мир, 1987.
22. Билобров В.М. Водородная связь. Внутримолекулярные взаимодействия. – Киев: Наукова думка, 1991.
23. Barnes A.J., Stuckey M.A., Gall L.Le. // Spectrochim. Acta. – 1984. – **40A**. – P. 419.
24. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Баранов В.И. // Журн. структур. химии. – 2010. – **51**, № 3. – С. 474.