

**СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ  
КОМПЛЕМЕНТАРНОЙ ПАРЫ ГУАНИН-ЦИТОЗИН В  
ИЗОЛИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ И ВОДНОМ РАСТВОРЕ**

**А.А. Яковлева\*, Г.Н. Тен\*, В.И. Баранов\*\***

\* *Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,*

\*\* *Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН*

В данной работе выполнен расчёт и проведено сравнение ИК и КР спектров комплементарной пары оснований нуклеиновых кислот гуанин-цитозин (Gua-Cyt) в изолированном состоянии и водном растворе методом DFT в приближении 6-311++G(D,p). При расчёте водного раствора использовалась модель реактивного поля (диэлектрическая проницаемость  $\epsilon=78.39$ , модель SCRF).

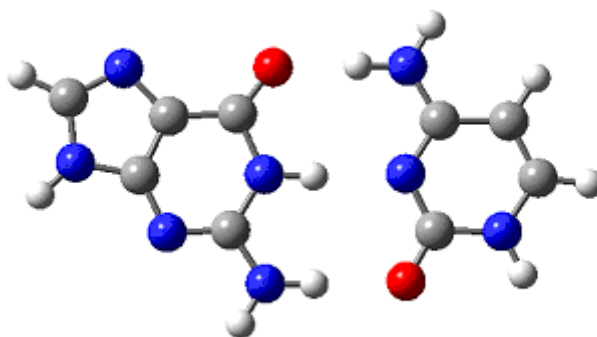


Рис. Комплементарная пара Gua-Cyt

1. Показано влияние каждой (O...HN, NH...N, NH...O) водородной связи на положения частот и значения интенсивностей нормальных колебаний изолированной пары Gua-Cyt по сравнению с изолированными молекулами Gua и Cyt.
2. Показано влияние водородных связей на положения частот и значения интенсивностей нормальных колебаний водного раствора Gua-Cyt по сравнению с колебательными спектрами водных растворов Gua и Cyt.
3. Определено влияние электростатических сил на колебательные спектры комплементарной пары и отдельных оснований.