

RAČUN SPINSKIH SVOJSTAVA RADIKALA U KRISTALU CITOZIN(TIOCITOZIN)-MONOHIDRATA

Vjeran Gomzi

Zavod za biofiziku, Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Ante Kovačića 1, 10000 Zagreb

U posljednjih nekoliko godina intenzivno se istražuje prijenos elektrona i šupljina u različitim modelima deoksiribonukleinske kiseline (DNA). Za prijenos radijacijske energije na velike udaljenosti unutar biološki važnih struktura pretpostavljeno je postojanje periodičkog potencijala. Dvostruka DNK uzvojnica predstavlja kvaziperiodički potencijal, barem po pojedinim dijelovima. Pitanje je kakav odnos, odnosno kakva interakcija među podjedinicama može osigurati prijenos elektrona, odnosno šupljina. Zato se istražuje prijenos energije/naboja/spina na velike udaljenosti u modelnim sistemima s različitim međusobnim odnosom baza nukleinskih kiselina. Pri tom je osobito važno pitanje je li jedino strukture sa slojevitim slaganjem baza, dakle i relativno jakom interakcijom preko π -elektrona omogućuju prijenos. Dosad je pokazano da je organizacija baza kao u molekulskim kristalima povoljna za prijenos šupljina. Pri tom je i pokazano da je tiocitozin, tioanalogon citozina, povoljna stupica za šupljine kao nosioce naboja [1].

Računom pomoću funkcionala gustoće (uporabom Gaussian 98W skupa programa) proučavana je raspodjela spina nesparenog elektrona radikala tiocitozina koji nastaje uhvatom šupljine na tiocitozinu, što je prisutan u kristalu citozina kao primjesa (dopand). Na taj način željelo se dodatno proučiti pridruženja hiperfinskih vezanja protona dobivena ENDOR mjerenjima [2] kako bi na tom, modelnom sistemu, bilo moguće doći do daljnjih informacija vezanih uz način i doseg prijenosa elektrona/šupljina kao i o ulozi slaganja baza u tim procesima.

Primjena kvantnomehaničkih proračuna na ovakve sisteme je vrlo interesantno ali i vrlo zahtjevno područje upravo zbog potrebe razlučivanja najvažnijih značajki kompleksnih sistema koje nameću ograničenja na modelni molekulski kompleks, a koje je nužno uključiti kako bi proračuni ispravno opisali mjerene veličine. Ovaj rad omogućuje spoznaje o važnosti lokalnih, odnosno kristalnih učinaka na promatrane fizičke veličine te pruža uvid u proširenje mogućnosti primjene teorijskih računa metodom funkcionala gustoće. Također, računi u ovom istraživanju nadopunjuju eksperimente i omogućuju ili olakšavaju ispravnu interpretaciju rezultata mjerenja.

[1] K. Sanković, D. Krilov and J. N. Herak, *Radiat. Res.*, 128 (1991) 299.

[2] J. N. Herak, K. Sanković, E. O. Hole and E. Sagstuen, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2 (2000) 4971.

lib. info.
159588