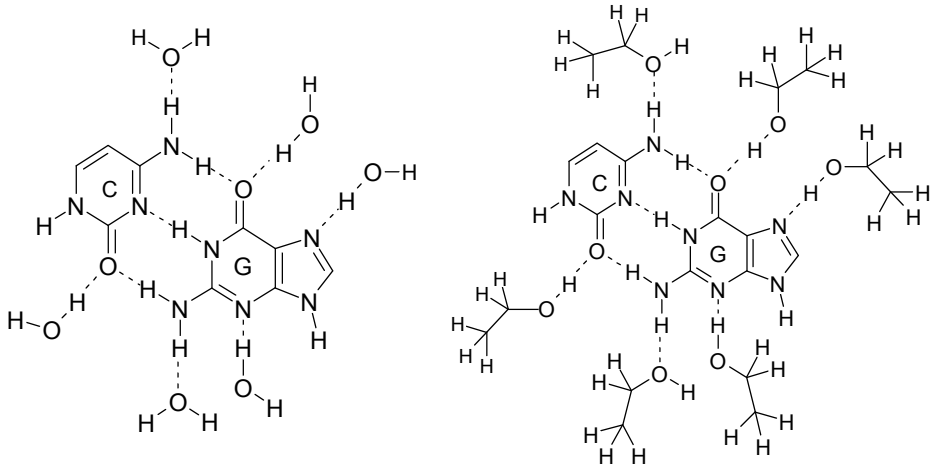
დნმ - ის დენატურაციისა და მუტაციური პროცესების სოლვატოქრომული ეფექტის ქვანტურ - ქიმიური მოდელირება

ჯუმბერ კერესელიძე[ა],
მარინე ქვარაია[ბ], ზურაბ ფაჩულია[ბ]
jumber.kereselidze@tsu.ge
[ა] ქიმიის დეპარტამენტი, ი. ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ი. ჭავჭავაძის პრ. 3, 0179, თბილისი
[ბ,ბ] ქიმიის დეპარტამენტი, სოხუმის სახელმწიფო უნივერსიტეტი, ანა პოლიტკოვსკაიას ქ. 9, 0186, თბილისი

გარემოს გავლენას ნუკლეოტიდურ ფუძეებს შორის პროტონის გადატანაზე გააჩნია გატამწყვეტი მნიშვნელობა დნმ - ში დენატურაციისა და მუტაციური პროცესების წარმართვისათვის. ამ პროცესების რაოდენობრივი აღწერისათვის გამოყენებულია პროტონის გადატანის აქტივაციის ($\Delta E^{\#}$) და რეაქციის(ΔE) ენერგიები და ლაქტამ-ლაქტიმური და ამინ-იმინური ტაუტომერული წონასწორობის მუდმივები [K_T(LL) და K_T(AI)], რომლებიც გამოთვლილია სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის ქვანტურ - ქიმიური მეთოდით (DFT - Density Functional Theory). ნაჩვენებია, რომ ეთანოლის წყალთან შერევის შედეგად გარემოს პოლარობის შემცირება (სოლვატოქრომული ეფექტი) , იწვევს პროტონის გადატანის აქტივაციის ენერგიის შემცირებას და მუტაციის სიხშირის (ν_m) ზრდას და მასთან ერთად დნმ-ის მიდრეკილებას დენატურაციისკენ. მაშასადამე, პროტონის გადატანის ენერგეტიკული და კინეტიკური მახასიათებლები შეიძლება გამოყენებულ იქნას დნმ - ში სოლვატოქრომული ეფექტის რაოდენობრივი აღწერისათვის. სოლვატოქრომული ეფექტის არსებობა დადასტურებულია უი სპექტრში დნმ - ის წყალხსნარის შთანთქმის ზოლის (260 ნმ) ბატოქრომული წანაცვლებით ეთანოლის ხსნარისათვის (273 ნმ).



ლიტერატურა:

1. W. Kohn, A. D. Becke, and R. G. Parr, Density Functional Theory of Electronic Structure. J. Phys. Chem. 100 (1996) 12974-12980.