

## Силовые поля гуанина в кето-енольной таутомерии

© Белик\*<sup>+</sup> Александр Васильевич, Строгалева Дарья Дмитриевна

Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.

Тел.: +7 (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** обобщенные силовые коэффициенты, координаты  $X_{\delta}^0$ , расчеты DFT, колебательный спектр, гуанин, кето-енольная таутомерия.

### Аннотация

Явление таутомерии в органической химии достаточно распространено. Однако в его детальном изучении имеются определенные сложности.

Настоящее исследование посвящено теоретическому изучению силового поля гуанина в кето-енольной таутомерии. Сам объект исследования играет важную роль в биохимии и молекулярной биологии. А силовое поле объекта является его важной физической характеристикой, поскольку в гармоническом приближении позволяет «разобраться» в его колебательном спектре. Под силовым полем понимается набор силовых коэффициентов, составляющих матрицу  $3N \times 3N$  в декартовой системе координат, где  $N$  – количество атомов в молекуле. У такой матрицы имеется большой недостаток, который состоит в том, что сами ее значения зависят от расположения атомов в пространстве. Достаточно молекулу повернуть в пространстве и все значения меняются. Избежать этого недостатка можно было за счет перехода во внутреннюю систему координат. Ранее исследователи предложили, так называемую, химическую систему координат, где в качестве переменных выступали длины валентных связей, валентных и двугранных углов. Однако в 70-ые годы прошлого столетия было показано, что такой переход не является корректным в общем случае, так как нет одной такой независимой координаты, которая бы описывала вращение одной группы атомов по отношению к другой. Оригинальный выход был найден профессором Маянцем Л.С. и Шалтупером Г.Б., которые предложили координаты  $X_{\delta}^0$ . В них молекула представляется набором «векторов связей», каждый из которых находится в своей собственной декартовой системе координат. След такой матрицы ( $3 \times 3$ ) назван «обобщенным силовым коэффициентом» связи.

Основные расчеты были выполнены в рамках квантово-химического метода теории функционала плотности, используя потенциал B3LYP/6-311++g(3df,3pd). Получено, что переход от кето-формы гуанина к енольной сопровождается уменьшением «жесткости связи» углерод-кислород на 5.3649 мдин/Å и увеличением «жесткости связи» C-NH<sub>2</sub> на 0.1723 мдин/Å. Наибольшей интенсивностью в ИК-спектре кето-формы гуанина обладает полоса в 1788.83 см<sup>-1</sup>, что соответствует валентному колебанию связи C=O (и связей шестичленного кольца, имеющих отношение к данному атому углерода). Наибольшей интенсивностью в ИК-спектре енольной-формы гуанина обладает полоса в 1679.66 см<sup>-1</sup>, что соответствует симметричным валентным колебаниям связей C<sub>1</sub>=N<sub>2</sub> и C<sub>5</sub>=N<sub>4</sub> шестичленного кольца.

Индикатором таутомерных преобразований молекул может выступать новый частотный структурно-чувствительный дескриптор  $\nu_{\text{ср.}}$ .

### Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Белик А.В., Строгалева Д.Д. Силовые поля гуанина в кето-енольной таутомерии. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №7. С.23-30. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-23

### Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Белик А.В., Строгалева Д.Д. Силовые поля гуанина в кето-енольной таутомерии. *Бутлеровские сообщения* А. 2024. Т.8. №3. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-23/ROI-jbc-RA/24-8-3-3

### The output for citing the English online version of the article:

Alexander V. Belik, Darya D. Strogaleva. Guanine force fields in keto-enol tautomerie. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.3. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-23/ROI-jbc-A/24-8-3-3