



# ЦИТОЗИН

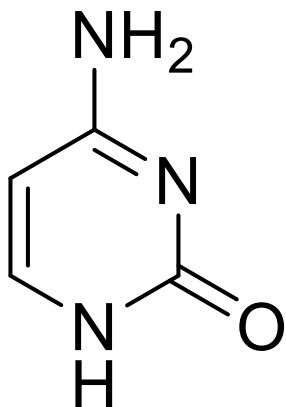


Рисунок 1 – Молекулярная формула 4-аминопиридина-2(1*H*)-она

Цитозин (4-аминопиридин-2(1*H*)-он) – пуриновое азотистое основание, производное пиридина. С рибозой образует нуклеозид цитидин, входит в состав нуклеотидов ДНК и РНК [1].

Впервые был получен в 1894 году Альбрехтом Косселем и Альбертом Нейманом в результате гидролиза тканей тимуса теленка [1].

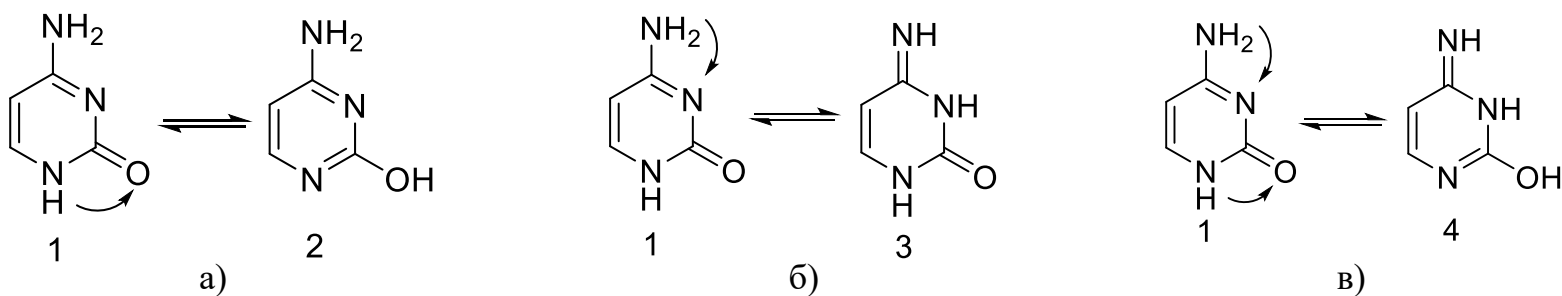
В 1930 году была предложена и доказана структура цитозина [1].

# Цель работы

Целью работы является исследование таутомерии цитозина методом DFT с использованием программы Gaussian 09W, определение в какой таутомерной форме находится цитозин в газовой фазе и в 6 средах различных растворителей.

# Таутомеры цитозина

Таутомерия – явление сосуществования изомерных форм, способных переходить друг в друга. Таутомерные переходы возможны в результате переноса протона, при этом происходит перераспределение электронной плотности в молекуле.



а) Лактим-лактаманная таутомерия; б) Амино-иминная таутомерия; в) Лактим-лактаманная и амино-иминная таутомерия.

Схема 1 – Таутомерные переходы цитозина

# Оптимизация геометрии

Оптимизация выбранных таутомеров проводилась с помощью функции Opt+Freq, включающая себя расчет оптимальной геометрии молекул и расчет колебательных вибраций.

Параметры расчета: # opt freq b3lyp/6-311++g(d,p)  
geom=connectivity.

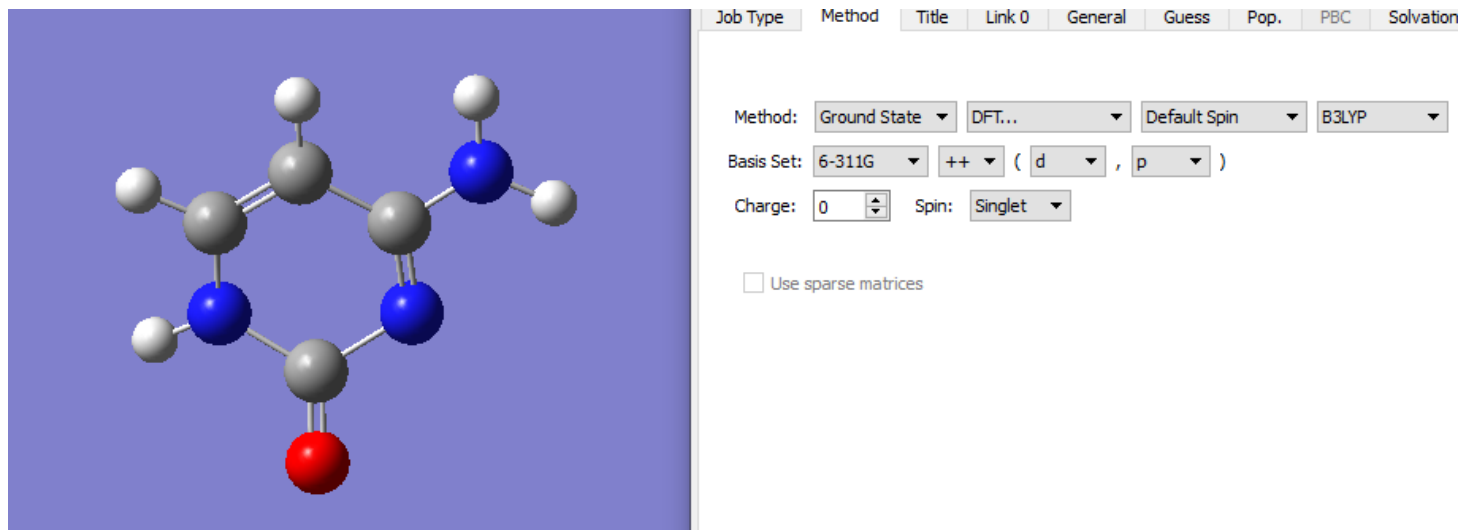
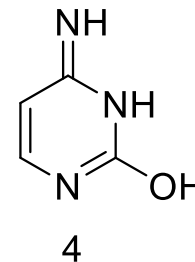
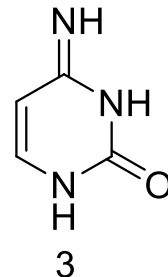
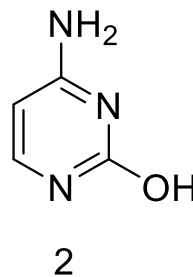
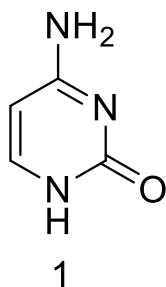


Рисунок 2 – Скриншот рабочего окна расчетов программы Gaussian 09W.

# Результаты вычислений. Газовая фаза

Таблица 1 – Результаты вычислений в газовой фазе

№ п/п	Энергия (B3LYP), Хартри	Энергия Гиббса (EE), Хартри	Дипольный момент, D
1	-395,053158	-394,98618	6,75
2	-395,050437	-394,982626	4,82
3	-395,050679	-394,982567	4,94
4	-395,018067	-394,951332	1,11



ккал/моль

0

2,23

2,27

21,87

кДж/моль

0

9,34

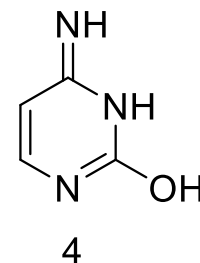
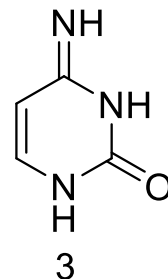
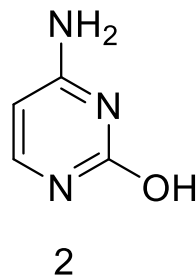
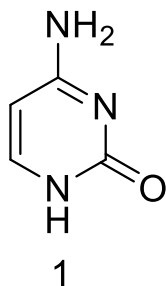
9,50

91,62

# Результаты вычислений. Хлороформ (неполярный растворитель)

Таблица 6 – Результаты вычислений в хлороформе

№ п/п	Энергия (B3LYP), Хартри	Энергия Гиббса (EE), Хартри	Дипольный момент, D
1	-395,069493	-395,002745	8,73
2	-395,060272	-394,993148	6,13
3	-395,062485	-394,994179	6,09
4	-395,030929	-394,963467	1,34



ккал/моль

0

6,02

5,38

24,65

кДж/моль

0

25,23

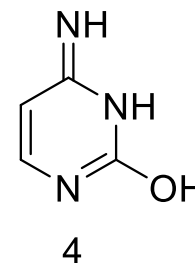
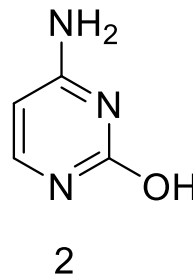
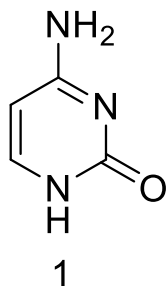
22,52

103,27

# Результаты вычислений. Вода (полярный протонный растворитель)

Таблица 2 – Результаты вычислений в воде

№ п/п	Энергия (B3LYP), Хартри	Энергия Гиббса (EE), Хартри	Дипольный момент, D
1	-395,076823	-395,009759	9,64
2	-395,064651	-394,997984	6,78
3	-395,067459	-394,999085	6,63
4	-395,036636	-394,968933	1,46



ккал/моль

0

7,39

6,70

25,62

кДж/моль

0

30,96

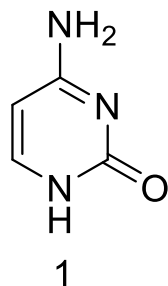
28,06

107,34

# Результаты вычислений. ДМСО (полярный апротонный растворитель)

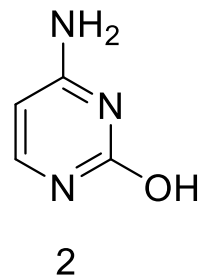
Таблица 4 – Результаты вычислений в ДМСО

№ п/п	Энергия (B3LYP), Хартри	Энергия Гиббса (EE), Хартри	Дипольный момент, D
1	-395,076459	-395,009405	9,59
2	-395,064434	-394,997735	6,74
3	-395,067216	-394,998845	6,60
4	-395,036354	-394,968659	1,46



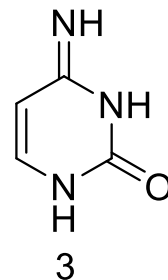
ккал/моль 0

кДж/моль 0



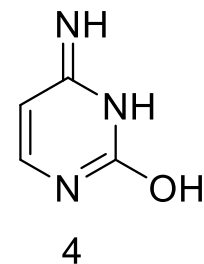
7,32

30,68



6,63

27,76



25,57

107,13

# Выводы

- Самой стабильной формой в газовой фазе и в растворителях является классическая форма цитозина, обладающая минимальной энергией, что было подтверждено квантово-химическими расчётами и сравнением экспериментальных спектральных свойств с рассчитанными;
- Таутомеры №2 и №3 (лактимная и иминная формы) имели схожую энергию переходов и дипольные моменты, которая была меньше, чем у таутомера №4 (смешанная форма);
- Наибольшая энергия переходов наблюдалась у таутомера №4, наименее устойчивой формы, которая при этом обладала наименьшим дипольным моментом;
- Наименьшей энергией таутомеры обладали в газовой фазе;
- Энергии переходов и дипольные моменты в полярных растворителях больше, чем в неполярных.