

# Az adenin molekula elektrongerjesztéseinek kísérleti és elméleti vizsgálata

Pós Eszter Sarolta, II. évf. vegyész

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Prof. Dr. Szalay Péter** egyetemi tanár  
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék  
**Dr. Tarczay György** egyetemi docens  
ELTE Szervetlen Kémiai Tanszék

A genetikai információt a pirimidin-, és purin-vázis bázispárokban hordozó nukleinsavak elektronszerkezetének különböző hullámhosszú sugárzások hatására bekövetkező változása nagymértékben befolyásolhatja azok helyes működését. Kiemelt jelentőséggel bír tehát a gerjesztési energia útjának követése a makromolekulában.

Korábbi kísérletek azt mutatták, hogy a DNS-t, illetve RNS-t felépítő nukleotidokban kizárólag a nitrogéntartalmú bázisok képesek a Napból a felhők által átengedett ultraibolya sugárzás abszorpciójára. Érdemes tehát ezen vegyületek elektrongerjesztéseit és a közeli gerjesztett állapotok rezgési módusokon keresztüli vibronikus csatolását figyelemmel követni.

Az adenin molekula UV-spektruskópiájának vizsgálatát két merőben eltérő módszerrel végeztem. Először mátrixizolációs módszerrel felvettem az UV-spektrumot, majd kvantumkémiai programok használatával meghatároztam a spektrumszimulációhoz szükséges paramétereket, melyekből a spektrum előzetes kisebb részekre bontásával kisebb számítási igényű feladatokból elkészítettem az elméleti színeképet. A kisebb számítási igényű számolások során fény derült arra, hogy nem szükséges minden állapot, és minden lehetséges csatolás figyelembe vétele. A teljes spektrum szimulációjához végül az  $1(\pi\pi^*)-1(n\pi^*)-2(\pi\pi^*)-3(\pi\pi^*)-3(n\pi^*)$  állapotokat és a köztük fellépő, jelentős  $\lambda$ -értékkel jellemezhető vibronikus csatolásokat használtam.

Célom ugyan a DNS-molekula csak egy kis részletének, az egyik nitrogéntartalmú bázisnak a vizsgálata volt, de ezalatt végig arra törekedtem, hogy ezt a lehető legmagasabb szintű kvantumkémiai módszerekkel tegyem meg. A mért és az elméleti úton kapott spektrumok összehasonlításából jól látszik, hogy az elméleti leírás sokkal részletesebb tárgyalásmódra ad lehetőséget, az  $n\pi^*$ -átmenetekhez tartozó csúcsok a kísérleti spektrumban nem jelennek meg, de az elméleti szimuláció során látott módon a fektetett burkolók alakját jelentősen befolyásolják. Ugyanakkor a két spektrum egymástól való eltérése azt mutatja, hogy a számításokat nem elég az itt használt szinten végezni.

Az, hogy képesek vagyunk a kísérletek szimulációjára elméleti úton, illetve az elmélet segítségével magyarázatot nyújthatunk a kísérleti tapasztalatokra, a gerjesztéseket az elektronok és a pályák szintjén leírhatjuk, mindenképp bizakodásra ad okot az óriásmolekulában lejátszódó elektrongerjesztési és elektronvezetési folyamatok megértésének szempontjából.