

Задание №6

Используя программу Gaussview построить геометрические конфигурации молекулярных моделей комплементарных пар азотистых оснований, которые показаны на рис.1

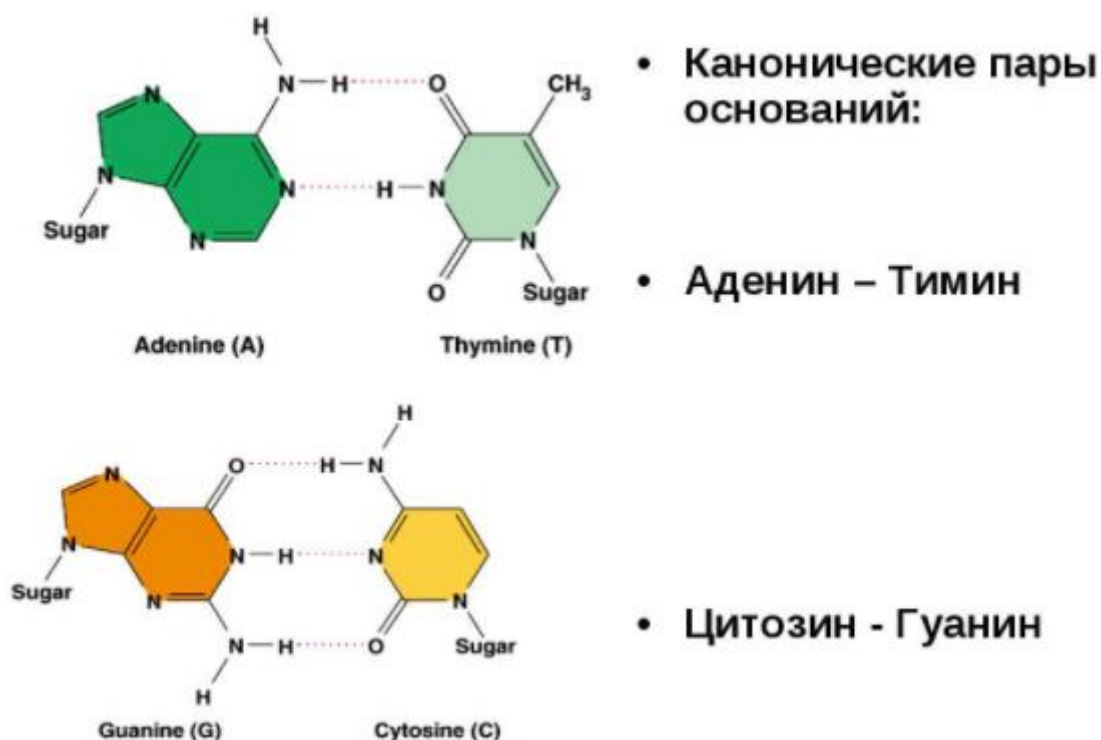


Рис.1 Молекулярные модели комплементарных пар азотистых оснований Аденин Тимин (АТ) и Гуанин Цитозин (ГЦ).

Используя программу Gaussian с применением методов B3LYP и базисного набора 6-311+G (d, p) рассчитать: оптимальную конфигурацию, колебательные частоты, интенсивности инфракрасного поглощения света, интенсивности комбинационного рассеяния света.

Полученные в результате расчета параметры внести в таблицы:

Таблица 1. Геометрические параметры пар азотистых оснований (метод B3LYP базис 6-311+G (d, p))

Геометрический параметр (длина связи, угол между связями, двугранный угол)	Значение (длина в ангстремах, угол в градусах)
Пара Аденин Тимин	
Пара Цитозин Гуанин	

Таблица 2. Колебательный спектр пар азотистых оснований (метод B3LYP базис 6-311+G (d, p))

Номер колебания	Тип симметрии колебания	Колебательное волновое число (см ⁻¹)	Интенсивность инфракрасного поглощения света	Интенсивность комбинационного рассеяния света
Пара Аденин Тимин				
Пара Цитозин Гуанин				

Таблица 3. Энергетические параметры азотистых оснований и их комплементарных пар (метод V3LYP базис 6-311+G (d, p))

Молекула	Полная энергия в ед. (Hartree)	Энергия межмолекулярного взаимодействия (водородных связей) в ед. (кДж/моль)
Аденин		-
Тимин		-
Цитозин		-
Гуанин		-
Пара (АТ)		
Пара (ГЦ)		