عنوان طرح: مطالعه ساختار كريستالي ۱-متيل‌يوراسيل در دماهاي مختلف با استفاده از محاسبه تئوري ثابتهاي كوپلاژ چهارقطبي هسته‌هاي 17O، 14N و 2H

مجري طرح : طيبه پرتوي

مدت اجرا : ۱۲ ماه

چكيده:

۱-متيل‌يوراسيل يكي از چهار باز سازنده RNA و از خانواده پيريميدين‌ها مي‌باشد. اين تركيب نقشهاي متعددي در سلولهاي زنده ايفامي‌كند و چون قابليت شركت در برهمكنشهاي بين مولكولي را دارد، بنابراين قادر به تشكيل جفت- باز با يوراسيل ديگر (يوراسيل:يوراسيل) و همچنين با باز آدنين (يوراسيل:آدنين) است.

اهميت ۱-متيل يوراسيل از آنجا ناشي مي‌شود كه گروه متيل در نيتروژن شماره ۱ جايگزين‌شده‌است و ساختار بلوري از حضور برهمكنشهاي ضعيف پيوند هيدروژني در اين مولكول حكايت‌دارد.

محاسبات كوانتومي به‌روش نظريه تابعيت چگالي (DFT) با استفاده از نرم‌افزار Gaussian-98 انجام‌شده‌است و نتايج به‌دست‌آمده در اين طرح، حاصل محاسبات رزونانس چهارقطبي هسته‌هاي 17O، 14N و 2H شامل ثابت جفت‌شدن چهارقطبي هسته C_κ و پارامتر نامتقارني η_κ هستند.

تغييرات كمتري در پارامترهاي NQR براي هسته‌هاي اكسيژن در ساختار ۱-متيل‌يوراسيل قابل پيش‌بيني است. بدين‌ترتيب قدرت پيوند هيدروژني ضعيفي، روي پارامترهاي NQR در هسته‌هاي O(2) و O(4) مشاهده‌مي‌شود.

از دو نيتروژن در مولكول ۱-متيل‌يوراسيل، N(1) كه باگروه متيل پيوند دارد، شانس خود را براي شركت مستقيم در برهمكنش پيوند هيدروژني ازدست‌مي‌دهد و N(3) باوجود اينكه از نظر شرايط طبيعي مستعد برهمكنش پيوند هيدروژني است، اما با توجه به ساختار بلوري و پارامترهاي محاسبه‌شده، به‌نظرمي‌رسد كه در ساختار بلوري بيشتر مورد حفاظت قرارمي‌گيرد تا اينكه تحت تأثير برهمكنشها باشد.

چون پيوندهاي هيدروژني در تركيبات بررسي‌شده ضعيف هستد، تأثير دما بر اين برهمكنشها ناچيز است.

در يک نتيجه‌گيري كلي، از آنجاييكه يوراسيل باز متعلق به RNA است و RNA در انتشار ويروس ايدز در سلول نقش اساسي دارد، بنابراين تغيير عملكرد ۱-متيل‌يوراسيل به يوراسيل از اين منظر حائز اهميت است.