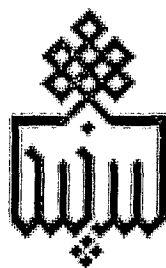


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

۱۳۴۱ هـ



دانشگاه بیرجند  
دانشکده علوم

## پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی برهم کنش های بین مولکولی و پیوند هیدروژنی  
در جفت باز آدنین - تیمین

استاد راهنما:

دکتر علی نیک اختر

استاد مشاور:

دکتر حیدر رئیسی

۱۳۸۸/۱۲/۲۶

مجلس اوقات درک علمی  
شهر بیرجند

نگارش:

فاطمه دادرس مقدم

زمستان ۱۳۸۷

۱۳۴۱۴۰



تاریخ: .....  
شماره: .....  
پیوست: .....

صورتجلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تاییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد خانم فاطمه دادرسی مقدم

به شماره دانشجویی: ۸۵۲۳۱۰۹۰۷۳ رشته: شیمی گرایش: شیمی فیزیک دانشکده: علوم دانشگاه بیرجند

تحت عنوان:

"بررسی برهم کنشهای بین مولکولی و پیوند هیدروژنی در جفت بازهای ادنین تیمین"

به ارزش: ۸ واحد در ساعت: ۸ روز: دوشنبه مورخ: ۸۷/۱۰/۳۰

با حضور اعضای محترم جلسه دفاع و نماینده تحصیلات تکمیلی به شرح ذیل تشکیل گردید:

سمت	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	اعضاء
استاد راهنما	آقای دکتر علی نیک اختر	استاد یار	
استاد مشاور	آقای دکتر حیدر رئیسی	استاد یار	
داور اول	آقای دکتر حسین فرسی	استاد یار	
داور دوم	آقای دکتر محمد سعید حسینی بجد	دانشیار	
نماینده تحصیلات تکمیلی	خانم دکتر معصومه جعفرپور	استاد یار	

نتیجه ارزیابی به شرح زیر مورد تایید قرار گرفت:

قبول (با درجه: عالی) و امتیاز: ۲۰/۰۰ (  دفاع مجدد  مردود

۱- عالی (۲۰-۱۸) ۲- بسیار خوب (۱۷/۹۹-۱۶) ۳- خوب (۱۵/۹۹-۱۴) ۴- قابل قبول (۱۳/۹۹-۱۲)

کلیه مزایا اعم از چاپ، تکثیر، نسخه برداری،

ترجمه، اقتباس و ... از پایان نامه کارشناسی

ارشد برای دانشگاه بیرجند محفوظ می باشد.

نقل مطالب با ذکر منبع بلامانع است.

تقدیم به :

پیشگاه ثامن الائمه که با توسل به محضرش آرامش روح یافتم،

پدر و مادر عزیزم، به پاس عاطفه سرشار و محبت بی دریغشان،

همسرم، به پاس مهربانی، گذشت و همکاریش،

برادر و خواهر مهربانم، که وجودشان شرشار از صفا و صداقت است،

و آنانکه دوستشان می دارم،...

## تقدیر و تشکر

سپاسگزارم خداوند یکتا را به واسطه الطاف و رحمت های بی پایانش.

اینک بر خود لازم می دانم از اساتید محترم راهنما و مشاورم، جناب آقای دکتر نیک اختر و جناب آقای دکتر رئیسی به خاطر راهنمایی ها و منش بزرگوارانه شان در طول این دوره مراتب تشکر و سپاس خود را به جای آورم.

از جناب آقای دکتر فرسی و جناب آقای دکتر حسینی که داوری پایان نامه اینجانب را پذیرفتند تشکر می کنم. همچنین از زحمات خانم دکتر جعفرپور نماینده محترم تحصیلات تکمیلی دانشگاه بیرجند سپاسگذاری می نمایم.

از تمامی اساتید محترم و بزرگواری که در طی این دوره از محضرشان علاوه بر علم، اخلاق و انسانیت آموختم قدردانی می کنم.

مضافاً از مسئولین کتابخانه مرکزی و مرکز اسناد دانشگاه بیرجند به واسطه امکانات و همکاری هایشان کمال تشکر را دارم.

## چکیده

پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی در جفت بازهای اسید نوکلئیک یک نقش کلیدی در اختصاصی کردن ساختار آن‌ها بازی می‌کند. ساختار جفت باز A-T و ساختارهای مختلف پیش‌بینی شده مربوط به این جفت باز با استفاده از محاسبات ab-initio در سطح محاسباتی  $B3LYP/6-31G^{**}$  و  $HF/6-31G^{**}$  در یک سری از سطوح نظریه تابعی چگالی،  $B3LYP/6-31G^{**}$  و  $B3LYP/6-31++G^{**}$  بهینه شد. پارامترهای ساختمانی و انرژی‌های بهینه شده به دست آمد و بر روی پایداری ساختارهای مختلف جفت باز بحث گردید. پایدارترین ساختار، در میان ساختارهای مختلف، ساختار AT(I) بود.

علاوه بر این قدرت پیوند هیدروژنی  $N-H \dots N$  و  $O-H \dots N$  در ساختارهای مختلف جفت باز A-T با یکدیگر مقایسه شد.

از طرف دیگر در مورد تأثیر مجموعه پایه بر روی انرژی برهم‌کنش جفت باز A-T با استفاده از سطوح محاسباتی مختلف بحث گردید. نتایج محاسبات نشان داد که سطح محاسباتی  $B3LYP/6-31G^{**}$  بیشترین برهم‌کنش با انرژی حدود  $-17/384 \text{ kcal/mol}$  را دارا می‌باشد. توابع پتانسیل جفت باز A-T بر اثر انتقال یک پروتون و همچنین انتقال همزمان دو پروتون، که شامل انتقال پروتون نیتروژن گروه آمین مولکول آدنین به نیتروژن گروه کربونیل مولکول تیمین و همچنین انتقال پروتون از نیتروژن تیمین به نیتروژن آدنین است، در سطح محاسباتی  $B3LYP/6-31G^{**}$  به دست آمد و نمودارهای surface و contoure مربوط به انتقال پروتون ذکر شده رسم گردید.

واژگان کلیدی: آدنین- تیمین، جفت باز واتسن- کریک، پیوند هیدروژنی، انرژی برهم‌کنش

## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

### فصل اول : پیوند های هیدروژنی

۱	..... ۱-۱ مقدمه	
۲	..... ۱-۲ تئوری و مکانیسم پیوند هیدروژنی	
۳	..... ۱-۳ طبقه بندی پیوند هیدروژنی	
۴	..... ۱-۳-۱ پیوند هیدروژنی بین مولکولی	
۴	..... ۱-۳-۲ پیوند هیدروژنی درون مولکولی	
۶	..... ۱-۳-۳ طبقه بندی هیدروژنی بر اساس پارامترهای مرتبط با قدرت	
۷	..... ۱-۳-۴ طبقه بندی بر اساس نوع تابع پتانسیل	
۹	..... ۱-۳-۴-۱ توابع تک کمینه ای نا متقارن	
۱۰	..... ۱-۳-۴-۲ توابع دو کمینه ای نا متقارن	
۱۰	..... ۱-۳-۴-۳ توابع دو کمینه ای متقارن	
۱۱	..... ۱-۳-۴-۴ توابع تک کمینه ای متقارن	
۱۲	..... ۱-۳-۵ پیوند هیدروژنی خطی و خمیده	
۱۲	..... ۱-۴ روش های مطالعه پیوند هیدروژنی	
۱۲	..... ۱-۴-۱ روشهای ترمودینامیکی	
۱۳	..... ۱-۴-۲ روش طیف سنجی	
۱۳	..... ۱-۴-۳ روش های پراش	



## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱۴	۴-۴-۱ روش های محاسبات مکانیک کوانتومی.....
<b>فصل دوم : شیمی محاسباتی</b>	
۱۶	۱-۲ مقدمه .....
۱۸	۲-۲ معادله شرودینگر .....
۲۰	۳-۲ انواع روش های محاسبات.....
۲۰	۲-۳-۱ روش های ab initio .....
۲۱	۲-۳-۱-۱ روش وردشی .....
۲۳	۲-۳-۱-۲ روش اختلال.....
۲۴	۲-۳-۲ روش هارتری- فاک.....
۲۶	۲-۳-۳-۲ انواع مجموعه های پایه.....
۲۶	۲-۳-۳-۱ مجموعه پایه کمینه.....
۲۷	۲-۳-۳-۲ مجموعه پایه نفوذی.....
۲۸	۲-۳-۳-۳ مجموعه پایه قطبشی.....
۲۹	۲-۳-۳-۴ مجموعه پایه زتای - دوتایی.....
۲۹	۲-۳-۴ روش های نیمه تجربی .....
۲۹	۲-۳-۴-۱ روش های هوکل و هوکل پیشرفته .....
۳۰	۲-۳-۴-۲ روش پاریزر - پار - پوپل.....

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۳۱	..... ۳-۴-۳-۲ روش CNDO و روش های مرتبط با آن
۳۲	..... ۵-۳-۲ نظریه تابع چگالی
۳۸	..... ۱-۵-۳-۲ روش های چگالی موضعی
۳۹	..... ۲-۵-۳-۲ روش های تعمیم یافته گرادیان
۴۱	..... ۳-۵-۳-۲ روش های هیبریدی ( ترکیب های هیبریدی از DFT و جملات HF )
۴۲	..... ۶-۲ معایب روش DFT

### فصل سوم : بررسی ساختار و پیوند هیدروژنی در مولکول DNA

۴۳	..... ۱-۳ مقدمه
۴۴	..... ۲-۳ بازهای موجود در مولکول DNA
۴۵	..... ۱-۲-۳ بازهای پرمیدین
۴۶	..... ۲-۲-۳ بازهای پورین
۴۷	..... ۳-۳ نوکلئوزیدها
۴۸	..... ۴-۳ نوکلئوتیدها
۴۹	..... ۵-۳ فرهای مختلف مولکول DNA
۴۹	..... B-DNA ۱-۵-۳
۵۳	..... ۱-۱-۵-۳ پیوند های هیدروژنی بین جفت بازهای مختلف مولکول DNA

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۵۴	۲-۱-۵-۳ انتقال پروتون در جفت باز A - T و G-C .....
۵۶	۲-۵-۳ زوایای پیچش در اسیدهای نوکلئیک .....
۵۸	۳-۵-۳ Z-DNA .....
۵۹	۴-۵-۳ A-DNA .....
۶۰	۶-۳ اهمیت مضاعف بودن بین پیوند هیدروژنی در مولکول DNA .....
۶۱	۷-۳ جفت باز .....
۶۳	۸-۳ اثر استخلاف در جفت بازها بر پیوند هیدروژنی .....

### فصل چهارم : بحث و تشریح نتایج

۶۵	۱-۴ مقدمه .....
۶۶	۲-۴ روش کار .....
۶۶	۱-۲-۴ بهینه سازی ساختار باز آدنین و ساختار باز تیمین .....
۶۷	۲-۲-۴ بهینه سازی ساختار جفت باز آدنین-تیمین .....
۷۱	۳-۲-۴ بررسی اثر مجموعه پایه بر روی انرژی برهم کنش .....
۷۱	۴-۲-۴ بررسی سطح انرژی پتانسیل دو بعدی و سه بعدی و برازش تابع پتانسیل به دست آمده با داده های تجربی .....
۷۲	۳-۴ بررسی ساختار بازهای آدنین و تیمین .....
۷۴	۴-۴ بررسی ساختار جفت باز آدنین-تیمین .....
۷۵	۵-۴ بررسی ساختارهای مختلف مربوط به جفت باز آدنین-تیمین .....

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۷۸	۶-۴ بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در جفت باز آدنین-تیمین .....
۷۹	۱-۶-۴ بررسی قدرت پیوند هیدروژنی میان اکسیژن گروه کربونیل تیمین و هیدروژن گروه آمین مولکول آدنین.....
۸۰	۲-۶-۴ بررسی قدرت پیوند هیدروژنی بین نیتروژن مولکول آدنین و هیدروژن متصل به نیتروژن مولکول تیمین.....
۸۱	۷-۴ بررسی قدرت پیوند هیدروژنی در ساختارهای متفاوت جفت باز آدنین-تیمین.....
۸۱	۱-۷-۴ بررسی قدرت پیوند هیدروژنی بین هیدروژن متصل به اکسیژن مولکول تیمین و نیتروژن مولکول آدنین.....
۸۶	۲-۷-۴ بررسی قدرت پیوند هیدروژنی بین هیدروژن متصل به نیتروژن آدنین و نیتروژن تیمین.....
۹۰	۸-۴ بررسی تأثیر مجموعه پایه بررسی انرژی برهم کنش.....
۹۳	۹-۴ بررسی وابستگی انرژی پتانسیل به طول پیوند هیدروژنی.....
۹۳	۱-۹-۴ بررسی سطح انرژی پتانسیل دو بعدی برای انتقال پروتون بین متصل به نیتروژن تیمین و نیتروژن آدنین در جفت باز آدنین-تیمین.....
۹۴	۲-۹-۴ برازش تابع پتانسیل دو بعدی برای انتقال پروتون بین نیتروژن تیمین و نیتروژن آدنین.....
۹۵	۳-۹-۴ بررسی سطح انرژی پتانسیل دو بعدی برای انتقال پروتون بین گروه کربونیل تیمین و گروه آمین مولکول آدنین در جفت باز آدنین-تیمین.....

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۹۶	۴-۹-۴ برآزش تابع پتانسیل دو بعدی برای انتقال پروتون بین نیتروژن گروه آمین مولکول آدنین و اکسیژن گروه کربونیل مولکول تیمین.....
۹۷	۵-۹-۴ بررسی سطح انرژی پتانسیل سه بعدی برای انتقال پروتون بین نیتروژن مولکول تیمین و نیتروژن مولکول آدنین در جفت باز آدنین-تیمین.....
۹۸	۶-۹-۴ برآزش تابع پتانسیل سه بعدی برای انتقال پروتون بین نیتروژن مولکول تیمین و نیتروژن مولکول آدنین.....
۹۹	۷-۹-۴ بررسی سطح انرژی پتانسیل سه بعدی برای انتقال پروتون بین گروه آمین آدنین و گروه کربونیل تیمین در جفت باز آدنین-تیمین.....
۱۰۰	۸-۹-۴ برآزش تابع پتانسیل سه بعدی برای انتقال پروتون بین گروه آمین آدنین و گروه کربونیل تیمین در جفت باز آدنین-تیمین.....
۱۰۱	۹-۹-۴ بررسی سطح انرژی پتانسیل سه بعدی برای انتقال هم زمان دو پروتون در جفت باز آدنین-تیمین.....
۱۰۲	۱۰-۹-۴ برآزش تابع پتانسیل سه بعدی برای انتقال هم زمان دو پروتون در جفت باز آدنین-تیمین.....
۱۰۳	۱۰-۴ نتیجه گیری.....
۱۰۳	۱۱-۴ کارهای آینده.....

## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۶	جدول (۱-۱) طبقه بندی تقریبی پیوند هیدروژنی سیستم $O-H \cdots O$ .....
۵۰	جدول (۱-۳) داده های به دست آمده توسط چارگاف برای بیان قانون چارگاف .....
۶۴	جدول (۲-۳) ثابت ترکیبی نسبی $K_A$ برای جفت آدنین با بازهای اوراسیل مختلف دارای گروه های استخلافی در موقعیت ۵ .....
۱۰۹	جدول (۱-۴) مقادیر انرژی حالت پایه برای باز آدنین و تیمین و جفت باز آدنین- تیمین و ساختارهای مختلف پیش بینی شده مربوط به آن .....
۱۱۰	جدول (۲-۴) طول پیوند های محاسبه شده برای باز آدنین .....
۱۱۰	جدول (۳-۴) زوایای پیوندی محاسبه شده برای باز آدنین .....
۱۱۱	جدول (۴-۴) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای باز آدنین .....
۱۱۱	جدول (۵-۴) طول پیوند های محاسبه شده برای باز تیمین .....
۱۱۲	جدول (۶-۴) زوایای پیوندی محاسبه شده برای باز تیمین .....
۱۱۲	جدول (۷-۴) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای باز تیمین .....
۱۱۳	جدول (۸-۴) طول پیوند های محاسبه شده برای جفت باز آدنین - تیمین .....
۱۱۴	جدول (۹-۴) زوایای پیوندی محاسبه شده برای جفت باز آدنین - تیمین .....
۱۱۵	جدول (۱۰-۴) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای جفت باز آدنین - تیمین .....
۱۱۶	جدول (۱۱-۴) طول پیوندهای محاسبه شده برای ساختار $AT(I)$ .....
۱۱۷	جدول (۱۲-۴) زوایای پیوندی محاسبه شده برای ساختار $AT(I)$ .....

## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۱۱۸	جدول (۴-۱۳) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای ساختار AT(I).....
۱۱۹	جدول (۴-۱۴) طول پیوندهای محاسبه شده برای ساختار AT(II).....
۱۲۰	جدول (۴-۱۵) زوایای پیوندی محاسبه شده برای ساختار AT(II).....
۱۲۱	جدول (۴-۱۶) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای ساختار AT(II).....
۱۲۲	جدول (۴-۱۷) طول پیوند های محاسبه شده برای ساختار AT(III).....
۱۲۳	جدول (۴-۱۸) زوایای پیوندی محاسبه شده برای ساختار AT(III).....
۱۲۴	جدول (۴-۱۹) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای ساختار AT(III).....
۱۲۵	جدول (۴-۲۰) طول پیوند های محاسبه شده برا ساختار AT(IV).....
۱۲۶	جدول (۴-۲۱) زوایای پیوندی محاسبه شده برای ساختار AT(IV).....
۱۲۷	جدول (۴-۲۲) زوایای دو وجهی محاسبه شده برای ساختار AT(IV).....
۹۲	جدول (۴-۲۳) مقادیر انرژی بر هم کنش بین جفت باز آدنین - تیمین در سطوح محاسباتی مختلف.....
۱۲۸	جدول (۴-۲۴) انرژی های به دست آمده بر حسب واحد kcal/ mol با تغییر طول پیوند .....N <sub>2</sub> O-H <sub>2</sub> O
۹۵	جدول (۴-۲۵) نتایج حاصل از برازش تابع پتانسیل دو بعدی برای انتقال پروتون بین نیتروژن تیمین و نیتروژن آدنین.....
۱۲۹	جدول (۴-۲۶) انرژی های به دست آمده بر حسب واحد kcal/ mol با تغییر طول پیوند NV-H <sub>8</sub> .....

## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۹۶	جدول (۲۷-۴) نتایج حاصل از برآزش تابع پتانسیل دو بعدی برای انتقال پروتون بین گروه آمین آدنین و گروه کربونیل تیمین.....
۹۹	جدول (۲۸-۴) نتایج حاصل از برآزش تابع پتانسیل سه بعدی برای انتقال پروتون بین نیتروژن آدنین و نیتروژن تیمین.....
۱۰۰	جدول (۲۹-۴) نتایج حاصل از برآزش تابع پتانسیل سه بعدی برای انتقال پروتون بین گروه آمین آدنین و گروه کربونیل تیمین.....
۱۰۲	جدول (۳۰-۴) نتایج حاصل از برآزش تابع پتانسیل سه بعدی برای انتقال همزمان دو پروتون.....



## فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۹	شکل (۱-۱) منحنی انرژی پتانسیل کیفی در گروه آزاد (-) و درگیر در پیوند هیدروژنی (...).
۱۰	شکل (۲-۱) نمایش تغییرات توابع پتانسیل و ترازهای انرژی از تک کمینه نامتقارن (راست) تا دو کمینه ای متقارن (چپ) .....
۱۱	شکل (۳-۱) نمایش تغییرات توابع پتانسیل و ترازهای انرژی از دو کمینه ای متقارن (چپ) تا تک کمینه ای متقارن (راست) .....
۴۴	شکل (۱-۳) بتا-۲-دزوکسی-D-ریبوز.....
۴۵	شکل (۲-۳) باز پورین، باز پیریمیدین.....
۴۵	شکل (۳-۳) بازهای پیریمیدین.....
۴۶	شکل (۴-۳) تاتومری لاکتیم-لاکتام.....
۴۶	شکل (۵-۳) بازهای پورین.....
۴۷	شکل (۶-۳) ساختمان نوکلئوزید.....
۴۸	شکل (۷-۳) آدنوزین 5' فسفریک اسید.....
۵۱	شکل (۸-۳) ساختار B-DNA.....
۵۲	شکل (۹-۳) نحوه به هم پیوستن مونونوکلئوتیدها برای ایجاد رشته های پلی نوکلئوتیدی در مولکول DNA.....
۵۳	شکل (۱۰-۳) پیوندهای هیدروژنی بین جفت باز آدین - تیمین.....
۵۴	شکل (۱۱-۳) پیوند هیدروژنی بین جفت باز سیتوزین - گوانین.....

## فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۵۵	شکل (۱۲-۳) انتقال پروتون در جفت باز آدنین - تیمین.....
۵۶	شکل (۱۳-۳) انتقال پروتون در جفت باز گوانین - سیتوزین.....
۵۷	شکل (۱۴-۳) زوایای پیچش اسید نوکلئیک.....
۵۷	شکل (۱۵-۳) صورت بندی های مختلف برای اسید نوکلئیک.....
۵۹	شکل (۱۶-۳) ساختار Z-DNA.....
۶۰	شکل (۱۷-۳) ساختار A-DNA.....
۶۲	شکل (۱۸-۳) جفت باز های واتسن کریک (a) ، واتسن کریک معکوس (b,c) و هوگستین (d).....
۶۳	شکل (۱۹-۳) جفت باز هوگستین.....
۶۶	شکل (۱-۴) باز آدنین (رسم گردیده توسط نرم افزار GaussView)
۶۷	شکل (۲-۴) باز تیمین (رسم گردیده توسط نرم افزار GaussView)
۶۸	شکل (۳-۴) جفت باز آدنین - تیمین.....
۶۹	شکل (۴-۴) ساختار AT(I).....
۶۹	شکل (۵-۴) ساختار AT(II).....
۷۰	شکل (۶-۴) ساختار AT(III).....
۷۰	شکل (۷-۴) ساختار AT(VI).....

## فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۱۰۵	نمودار (۱-۴) سطح انرژی پتانسیل دو بعدی بر حسب فاصله $(N_2-H_2O)$ .....
۱۰۵	نمودار (۲-۴) سطح انرژی پتانسیل دو بعدی بر حسب فاصله $(NV-HA)$ .....
	نمودار (۳-۴) نمودار surface مربوط به انتقال پروتون بین نیتروژن مولکول تیمین و نیتروژن
۱۰۶	مولکول آدنین.....
	نمودار (۴-۴) نمودار surface مربوط به انتقال پروتون بین نیتروژن گروه آمین مولکول آدنین و
۱۰۶	اکسیژن گروه کربونیل مولکول تیمین.....
۱۰۷	نمودار (۵-۴) نمودار Surface مربوط به انتقال دو پروتون.....
	نمودار (۶-۴) نمودار Contour مربوط به انتقال پروتون بین نیتروژن مولکول تیمین و نیتروژن
۱۰۷	مولکول آدنین.....
	نمودار (۷-۴) نمودار Contour مربوط به انتقال پروتون بین نیتروژن گروه آمین مولکول آدنین
۱۰۸	و اکسیژن گروه کربونیل مولکول تیمین.....
۱۰۸	نمودار (۸-۴) نمودار Contour مربوط به انتقال دو پروتون.....

# فصل اول

پیوند های هیدروژنی