



Структура и функция биополимеров

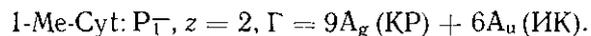
УДК 535.3:543.423:577.1

Д. Н. Говорун, Я. Р. Мищук, Н. В. Желтовский

НИЗКОЧАСТОТНЫЕ СПЕКТРЫ КР НЕКОТОРЫХ МЕТИЛЗАМЕЩЕННЫХ КОМПОНЕНТОВ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ: 1-МЕТИЛПРОИЗВОДНЫЕ ПИРИМИДИНОВЫХ ОСНОВАНИЙ

Выполнено детальное исследование низкочастотных ($10-15 \text{ см}^{-1} < \nu < 200 \text{ см}^{-1}$) спектров КР света поликристаллических 1-метилцитозина, 1-метилурацила и 1-метилтимина при 300 К. Отождествлены полосы, соответствующие колебаниям кристаллической решетки, а также полосы, принадлежащие низкочастотным неплоским внутримолекулярным колебаниям. Обсуждается влияние метилирования пириимидиновых оснований по гликозидной связи на их низкочастотные спектры КР. Авторы приходят к выводу о перспективности использования спектроскопии КР света на колебаниях кристаллической решетки для изучения структурно-динамических свойств твердотельных биомолекулярных комплексов.

Исследование посвящено изучению низкочастотных спектров КР 1-метилзамещенных пириимидиновых оснований — 1-метилцитозина, 1-метилурацила и 1-метилтимина, находящихся в поликристаллическом состоянии при $T=300 \text{ К}$ (см. также [1]).



Как видно из табл. 1, полученные нами данные по частотам колебаний хорошо согласуются с таковыми, приведенными в работе [2]. При этом уточнены значения частот трех наиболее низкочастотных колебаний 43,9; 69,9 и 75,5 см^{-1} . Дополнительно в спектре наблюдается малоинтенсивная полоса 153,8 см^{-1} — ее логично отнести к «внешнему» крутильному колебанию Me-группы относительно кольца. Дополнительным аргументом в пользу такой интерпретации, кроме высказанных выше, является достаточно большая ее полуширина ($\Delta\nu_{1/2} = 11,2 \text{ см}^{-1}$), что может свидетельствовать о наличии сильного ангармонизма (как известно, крутильные колебания Me-группы являются сильно ангармоничными). Решеточный ИК-спектр 1-Me-Cyt в литературе отсутствует. Тем не менее, основываясь на качественных соображениях, можно выполнить частичную предварительную интерпретацию решеточных мод в спектре КР: на наш взгляд, наиболее интенсивные полосы 69,9; 75,5 и 43,9 см^{-1} можно отнести к либрационным, а полосу сравнительно небольшой интенсивности 139,8 см^{-1} — к растяжению водородных связей. Характерно, что в 1-Me-Cyt по сравнению с Cyt (в спектре КР Cyt наиболее высокочастотное решеточное колебание наблюдается на частоте 160,4 см^{-1}) верхняя граница решеточного спектра КР сдвигается в область низких частот приблизительно на 20 см^{-1} , при этом нижняя граница смещается в ту же сторону незначительно — всего лишь на 2,7 см^{-1} (рис. 1).

© Д. Н. ГОВОРУН, Я. Р. МИЩУК, Н. В. ЖЕЛТОВСКИЙ, 1991

1-Me-Ura: $I_{\text{вн}}(D_{2h}^{26})$, $z = 8$, $\Gamma = 6A_g(\text{КР}) + 6B_{1g}(\text{КР}) + 6B_{2g}(\text{КР}) + 6B_{3g}(\text{КР}) + 6A_u + 5B_{1u} + 5B_{2u}(\text{ИК}) + 5B_{3u}(\text{ИК})$.

Полученные нами данные по частотам колебаний (табл. 2) хорошо согласуются с данными других авторов [2— 6], в том числе полученными с использованием монокристаллического образца [4, 5]. Обращает на себя внимание, что только в работе [5] в решеточном спектре КР 1-Me-Ura (кристаллический образец) наблюдался фонон с частотой

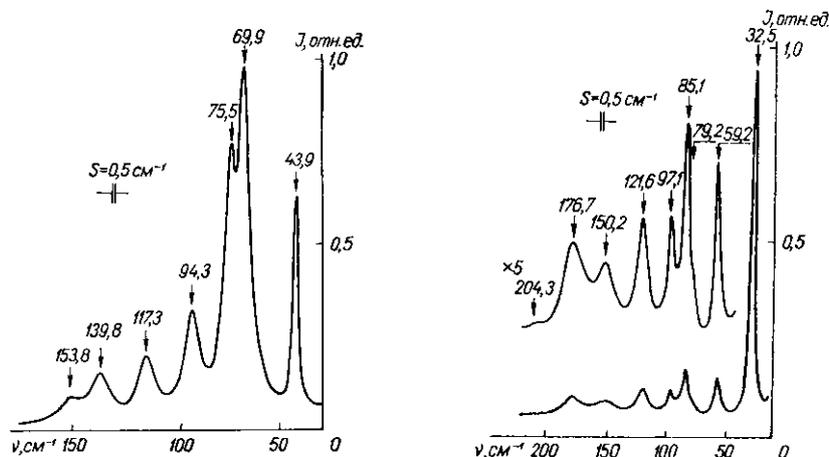


Рис. 1. Низкочастотный ($10 \text{ см}^{-1} < \nu < 200 \text{ см}^{-1}$) спектр КР света поликристаллического 1-метилцитозина при 300 К

Fig. 1. Low-frequency ($10 \text{ cm}^{-1} < \nu < 200 \text{ cm}^{-1}$) Raman spectrum of polycrystalline 1-methylcytosine at 300 K

Рис. 2. Низкочастотный ($10 \text{ см}^{-1} < \nu < 210 \text{ см}^{-1}$) спектр КР света поликристаллического 1-метилурацила при 300 К

Fig. 2. Low-frequency ($10 \text{ cm}^{-1} < \nu < 210 \text{ cm}^{-1}$) Raman spectrum of polycrystalline 1-methyluracil at 300 K

той 48 см^{-1} . Очевидно, это артефакт (соответствующая спектрограмма в работе [5], к сожалению, не приведена). Не исключено также, что это проявление запрещенной в КР-спектре полосы при 50 см^{-1} , активной в ИК-спектре [3], индуцированное дефектами исследуемого кри-

Таблица 1

Параметры низкочастотных ($10 \text{ см}^{-1} < \nu < 200 \text{ см}^{-1}$) полос колебаний в спектре КР света поликристаллического 1-метилцитозина

Parameters of low frequency ($10 \text{ cm}^{-1} < \nu < 200 \text{ cm}^{-1}$) vibrational bands of polycrystalline 1-methylcytosine Raman spectrum

Наши данные (300 К)			[2]* (307—308 К)	
ν	$\Delta\nu_{1/2}$	I	ν	I
43,9	2,5	24	47 (46)	5 (5)
69,9	8,3	100	72 (71)	> 10 (> 10)
75,5	3,4	40	77 (77)	
94,3	7,4	19	95 (95)	4 (4)
117,3	7,4	15	118 (117)	2 (2)
139,8	9,3	12	140 (138)	2 (2)
153,8**	11,2	7	—	—

* В скобках приведены значения для 1-метилцитозина- d_2 ; интегральная интенсивность внутримолекулярной полосы при 1263 см^{-1} (1272 см^{-1}) принята за 10 усл. ед.; ** полоса, зарегистрированная впервые.

Примечание. Здесь и далее частоты ν и полуширины $\Delta\nu_{1/2}$ полос приведены в см^{-1} , интегральные интенсивности I — в отн. ед., причем интегральная интенсивность самой сильной полосы принята за 100 усл. ед.; sh — плечо; колебания решетки отделены от внутримолекулярных колебаний горизонтальной чертой.

сталла. Из сравнения наших данных с поляризованным решеточным спектром КР монокристалла 1-Ме-Уга [4] следует, что меньшее количество полос в решеточном спектре КР поликристалла, нежели предсказывает теоретико-групповой анализ, наблюдается по причине переналожения фононов различной симметрии, имеющих близкие частоты, а не в силу исчезающе слабой интенсивности некоторых полос, не поддающейся регистрации. Характерно, что решеточные спектры КР Уга и 1-Ме-Уга располагаются практически в одном и том же диапазоне частот.

Нами предложена также интерпретация низкочастотных внеплоскостных внутримолекулярных колебаний кристаллического 1-Ме-Уга (табл. 3), которая удовлетворительно согласуется как с теоретическими [7], так и с экспериментальными данными [2—6], включающими результаты исследований поляризованных колебательных спектров монокристалла [4, 5] и широкого семейства изотопозамещенных аналогов [5]. До настоящего времени непротиворечивое решение этой задачи отсутствовало — это связано как с известными трудностями расчета вышеупомянутых колебаний (см., например, [7]), так и с тем обстоятельством, что они не наблюдались в газообразном состоянии, растворе и в условиях низкотемпературной матричной изоляции [8].

Прежде всего мы исходили из того, что самое высокочастотное решеточное колебание в спектре КР 1-Ме-Уга имеет частоту $121,6 \text{ см}^{-1}$, следовательно, все более высокочастотные колебания являются внутримолекулярными. Обычно наибольшие трудности сопряжены с идентификацией в экспериментально наблюдаемом спектре «внешнего» крутильного колебания Ме-группы относительно кольца (см., например, [7]), так как в силу большой ангармоничности его частота не может быть предсказана теоретически с удовлетворительной точностью. Мы, как и авторы работы [4], полагаем, что этому колебанию соответствует Давыдовский дублет $150,2\text{—}176,7 \text{ см}^{-1}$, наблюдающийся в спектре КР. Дополнительным аргументом в пользу такой интерпретации явля-

Таблица 2

Параметры низкочастотных ($10 \text{ см}^{-1} < \nu < 210 \text{ см}^{-1}$) полос в колебательном спектре твердого 1-метилурацила

Parameters of low frequency ($10 \text{ cm}^{-1} < \nu < 210 \text{ cm}^{-1}$) vibrational bands in solid 1-methyluracil spectrum

Наши данные ¹ (300 К)			КР						ИК		
			[2] ² (307—308 К)		[3] ³	[5] ⁴	[4] ⁵	[6] ⁶	[3] ³	[4] ⁶	[5] ⁴
ν	$\Delta\nu_{1/2}$	I	ν	I	ν						
32,5	3,0	100	34 (34)	10 (10)	32	30	31	34			
—	—	—	— (—)	— (—)	—	48	—	—			
59,2	4,6	13	62 (62)	3 (3)	60	57	58,60	62	52(52)	50	—
79,2 sh	—	2	— (—)	— (—)	—	79	78	—	61(61)	60	—
85,1	5,9	19	89 (87)	5 (5)	87	85	85,86	89	82(78)	80	78
97,1	4,3	10	100 (100)	2 (2)	100	97	97	101	97(97)	95	98
121,6	8,6	14	124 (122)	1 (1)	123	121	120; 121	125			
150,2	15,0	13	155 (155)	1 (1)	154	150	150	153			
176,7	17,5	20	180 (180)	1 (1)	182	177	178	178			
204,3*	—	0,2	— (—)	— (—)	—	—	—	—			195

¹ Поликристалл; ² поликристалл; в скобках приведены значения для 1-метилурацила-d₁; ³ поликристалл; температура не указана; в скобках приведены значения для 1-метилурацила-d₁; ⁴ монокристалл; температура не указана; ⁵ монокристалл; температура не указана; частоты через запятую соответствуют фононам различной симметрии; ⁶ поликристалл; температура не приведена.

ется близость форм контуров его компонентов (рис. 2) и полуширин (15,0 и 17,5 см⁻¹ соответственно); большие значения последних нетипичны для кристаллических колебаний и свидетельствуют о большом агармонизме. При изотопозамещении 1-Me-Ura → 1-CD₃-Ura частоты этого дублета понижаются незначительно (высокочастотный компонент — на 7 см⁻¹) по сравнению с теоретически вычисленным в гармоническом приближении [5], однако это не опровергает, на наш взгляд, принятой интерпретации, так как гармоническое приближение в этом случае неприменимо. В этом нетрудно убедиться, сравнив теоретическое значение частоты этого колебания (75 см⁻¹), рассчитанное в гармоническом приближении, с экспериментально наблюдаемым (см. табл. 3) — погрешность расчета составляет более 100 %. Такая интерпретация согласуется также и с результатами исследования спектра КР 1-Me-Ura в растворе DMSO-d₆ в низкочастотной области [5]: при переходе к раствору резонансные межмолекулярные взаимодействия практически полностью исчезают и вместо дублета в этой области частот наблюдается одиночная линия, при этом все более низкочастотные полосы, соответствующие колебаниям кристаллической решетки, в спектре раствора отсутствуют. Интерпретацию остальных внеплоскостных низкочастотных колебаний (см. табл. 3) проводили, исходя из теоретических [7] и экспериментальных результатов [4, 5, 8] и добиваясь их наилучшей непротиворечивой согласованности.

Необходимо также отметить, что расчетной частоте $\nu_{31} = 807$ см⁻¹, которую авторы работы [7] не смогли идентифицировать в экспериментально наблюдаемом спектре, соответствуют, на наш взгляд, экспериментальные значения 805 см⁻¹ (КР) [4] и 814 см⁻¹ (ИК) [8]. Кроме того, малоинтенсивный дублет 520—525 см⁻¹, наблюдающийся в спектре КР [4] и не имеющий соответствующих аналогов в ИК-спектре [5], можно, по-видимому, интерпретировать как обертон фундаментального колебания ν_{36} (в обозначениях работы [7]).

По аналогии с 1-Me-Ura мы также предложили интерпретацию двух наиболее низкочастотных непланарных колебаний кольца поликристаллического Ura (табл. 4). Такое отнесение позволяет наиболее

Таблица 3

Интерпретация низкочастотных неплоских внутримолекулярных колебаний в спектре кристаллического 1-метилурацила

Low frequency out-of-plane intramolecular vibration assignment in crystalline 1-methyluracil spectrum

Номер колебания			Интерпретация колебания [4, 5, 7]	Частота, см ⁻¹						
[7]	[4]	[5]		КР-спектр			ИК-спектр		Расчет [7]	
				[5] ¹	[4] ¹		[5] ³	[8] ⁴		
					ν_{3g}	ν_{2g}	Наши данные ² (300 К)			
39	13	39	«Внешнее» кручение Me-группы относительно кольца	150; 177	150	178	150,2; 176,7	—	—	75
38	9	30	Изгиб кольца	—	—	—	204,3	195	—	107
37	8	29	Изгиб кольца	—	235	237	—	—	—	188
36	4	28	Качание Me-N ₁	267	270	268	—	257	255	258
35	7	26	Изгиб кольца	446	442	445	—	448	—	417

¹ Монокристалл; температура не указана; ² поликристалл; ³ кристаллическая пленка; температура не указана; ⁴ кристаллическая пленка, T=300 К.

оптимальным образом согласовать между собой результаты теоретических расчетов [12, 16] с экспериментальными данными [9—11, 13, 17].

1-Me-Thy: $P2_{1/c}(C_{2h}^5)$, $z=4$, $\Gamma=6A_g(KP)+6B_g(KP)+5A_u(ИК)+4B_u(ИК)$.

Наши данные по частотам колебаний (табл. 5, рис. 3) хорошо согласуются с данными других авторов [3, 6, 14], в том числе полученными на монокристаллическом образце [3, 14]. При этом уточнены значения частот двух наиболее низкочастотных колебаний 25,4 и 30,6 $см^{-1}$. Последнее из них, которое не было наблюдаемо в спектре КР

Таблица 4

Интерпретация двух низкочастотных изгибных неплоскостных колебаний 10-го ряда в спектре поликристаллического урацила

The assignment of two low frequency out-of-plane bending vibrations of ring in polycrystalline uracil spectrum

Номер колебания [12, 13, 16]	Интерпретация [12, 13, 16]	Частота, $см^{-1}$								Расчет	
		КР-спектр			ИК-спектр					[12]	[16]
		[15] ¹ , 300 К	[11] ²	[6] ³	[10] ⁴	[9] ⁵ (98—293 К)	[6] ³	[17] ⁵			
30	т, изгиб кольца	140,7; 155,7	140; 153	—; 156	152; 167	—	160	159	159; 172	66	172
29	т, изгиб кольца	167,0; 181,7	—	—	194	194	192	192; 198	200; 224	119	187

¹ Поликристалл; ² температура не указана; см. также библиографию к табл. 3 в работе [11]; ³ поликристалл; температура не указана; ⁴ порошок в полиэтиленовой таблетке; комнатная температура; ⁵ порошок в полиэтиленовой таблетке.

Таблица 5

Параметры низкочастотных ($15\text{ см}^{-1} < \nu < 200\text{ см}^{-1}$) полос в колебательном спектре твердого 1-метилтимина

Parameters of low frequency ($15\text{ см}^{-1} < \nu < 200\text{ см}^{-1}$) bands in solid 1-methylthymine vibrational spectrum

Наши данные ¹ (300 К)			КР			ИК		
ν	$\Delta\nu_{1/2}$	I	[3] ²	[14] ³	[6] ²	[3] ²	[14] ³	[6] ²
ν			ν	ν	ν	ν	ν	ν
25,4 sh	—	2	—	28	27	23?	~30	—
30,6 sh	—	3	—	—	35	—	—	—
43,2	4,8	14	—	42; 44	45	42?	~40	—
61,3 sh	—	9	61 (61)	61	65	56	56	57
73,2	12,3	100	73 (73)	72; 72	76	69	69	70
81,6 sh	—	6	—	81	—	79	80	~80
105,3	15,0	80	106 (106)	104; 104	106	96	94	95
—	—	—	—	108	107	—	—	—
137,8	—	2	140?	—	~140	—	—	—
164,7*	—	2	—	—	—	170	—	175
						198	—	—

¹ Поликристалл; ² поликристалл; температура не указана; в скобках приведены частоты дейтероаналога; ³ монокристалл; температура не указана; частоты через запятую соответствуют фононам различной симметрии; ⁴ монокристалл; температура не указана. * Полоса, зарегистрированная впервые.

монокристалла [3], интерпретируется как V_g фонон с расчетной частотой 41 см^{-1} (модель I) или 33 см^{-1} (модель II) (см. табл. 3 в работе [14]). Из сравнения наших данных с поляризованным решеточным спектром КР монокристалла 1-Ме-Thu [14] следует, что меньшее количество полос в решеточном спектре КР поликристалла, нежели предсказывает теоретико-групповой анализ, наблюдается по причине переналожения полос колебаний различной симметрии, имеющих близкие частоты, а не в силу исчезающе слабой интенсивности некоторых полос, не поддающейся регистрации. Характерно, что решеточные спектры КР Thu и 1-Ме-Thu располагаются практически в одном и том же частотном диапазоне.

Выскажем также некоторые соображения, касающиеся интерпретации низкочастотных неплоских внутримолекулярных колебаний 1-Ме-Thu, — в литературе эта проблема практически не затрагивалась. Согласно расчетам,

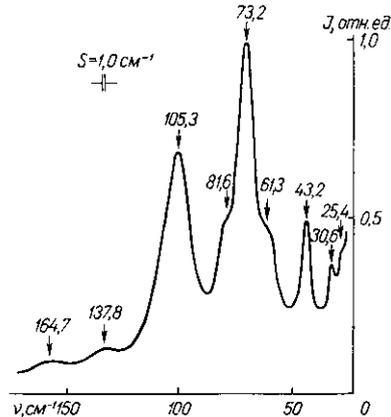


Рис. 3. Низкочастотный ($15 \text{ см}^{-1} < \nu < 200 \text{ см}^{-1}$) спектр КР света поликристаллического 1-метилтимина при 300 К
Fig. 3. Low-frequency ($15 \text{ см}^{-1} < \nu < 200 \text{ см}^{-1}$) Raman spectrum of polycrystalline 1-methylthymine at 300 K

удовлетворительно согласующимся с результатами эксперимента, наиболее высокочастотным решеточным колебанием в КР спектре 1-Ме-Thu является полоса 108 см^{-1} , соответствующая растяжению водородных связей [14]. Таким образом, все вышележащие колебания относятся ко внутримолекулярным. На наш взгляд, дублет $137,8$ — $164,7 \text{ см}^{-1}$, наблюдающийся в спектре КР, и полосу 170 см^{-1} [3] (175 см^{-1} [6]), наблюдающуюся в ИК-спектре, следует отнести ко «внешним» неплоским крутильным колебаниям Ме-группы относительно кольца. Полоса при 198 см^{-1} , наблюдающаяся в ИК-спектре, по-видимому, является самым низкочастотным неплоским изгибным колебанием кольца. Самое высокочастотное неплоское изгибное колебание кольца лежит на частоте 455 см^{-1} [15]. Полосу 245 см^{-1} в ИК-спектре [15] можно отнести к неплоским качаниям Ме-группы и/или к неплоскому изгибному колебанию кольца. Для более надежного отождествления полос в области 115 — 230 см^{-1} необходимы поляризационные и низкотемпературные исследования, а также теоретический расчет колебательного спектра.

По аналогии с 1-Ме-Thu мы также предложили интерпретацию четырех наиболее низкочастотных непланарных колебаний кристаллического Thu (табл. 6). Не останавливаясь подробно на ее анализе, отметим только, что в пользу отнесения дублета $154,5$ — $172,2 \text{ см}^{-1}$, наблюдающегося в спектре КР (в ИК-спектре ему соответствует дублет 152 — 172 см^{-1} [6]), свидетельствует достаточно большая полуширина его компонент ($\Delta\nu_{1/2} = 12,1 \text{ см}^{-1}$ для низкочастотного компонента).

Следует отметить, что устойчиво повторяющееся присутствие дублета в области внешнего неплоского крутильного колебания Ме-группы относительно кольца может также свидетельствовать о существовании двух поворотных конформеров в поликристаллических метилзамещенных по гликозидной связи нуклеотидных оснований. Для подтверждения данного предположения нужны детальные исследования в этом направлении.

Анализ вышеизложенного материала позволяет сделать следующие выводы. Выполнено детальное изучение низкочастотных спектров КР метилированных нуклеотидных оснований, моделирующих структуры

Таблица 6

Интерпретация низкочастотных неплоских внутримолекулярных колебаний в спектре поликристаллического тимина

The assignment of low frequency nonplanar intramolecular vibrations in polycrystalline thymine spectrum

Интерпретация колебания	Частота, см ⁻¹				
	ИК-спектр			КР-спектр	
	[6] ¹	[9] ² (2:3 К)	[10] ³	[18] (300 К)	[6] ¹
Внешнее кручение					
Me-группы относительно кольца	~ 152; ~ 172	~ 150; ~ 180*	—	154,5; 172,2	157; 175
Изгиб кольца		210	206		
Изгиб кольца		—	~ 265§		
Качание Me-C ₅		280	285		

¹ Поликристалл; температура не указана; ² порошок в полиэтиленовой таблетке; * Частоты определены из спектрограммы при T=98 К; ³ порошок в полиэтиленовой таблетке; комнатная температура; § — частота определена из спектрограммы.

нуклеиновых кислот. Интерпретированы их низкочастотные непланарные внутримолекулярные колебания, отнесение которых наиболее часто дискутируется в литературе; выделены решеточные колебания. Методом низкочастотного комбинационного рассеяния света установлено, что метилирование пуриновых нуклеотидных оснований по девятому положению приводит к некоторому ослаблению сил кристаллической упаковки. Это проявляется в понижении верхней границы фонного спектра в сторону низких частот.

Метилирование азотистых оснований по гликозидной связи приводит к появлению в решеточном спектре КР низкочастотного интенсивного добротного колебания либрационного типа.

В решеточных спектрах КР метилированных нуклеотидных оснований наблюдается меньшее количество полос, нежели предсказывает теоретико-групповой анализ, так как фононы различной симметрии имеют близкие частоты. Их разделение может быть достигнуто понижением температуры образца.

Достаточно большая интенсивность межмолекулярных спектров метилированных нуклеотидных оснований, сравнимая с таковой для внутримолекулярных колебаний, небольшая полуширина их полос (в среднем несколько см⁻¹ в поликристаллическом состоянии), а также высокая их чувствительность к величине и характеру межмолекулярных взаимодействий позволяют использовать КР света на колебаниях кристаллической решетки для изучения структурно-динамических свойств более сложных биомолекулярных комплексов.

Полученные спектральные данные будут использованы для расчета фонных спектров с целью получения силовых характеристик водородных связей.

Резюме

Проведено детальне дослідження низькочастотних (10—15 см⁻¹ ν <math>< 200</math> см⁻¹) спектрів КР світла полікристалічних 1-метилцитозину, 1-метилурацилу та 1-метилтиміну при 300 К. Ототожені смуги, що відповідають коливанням кристалічної ґратки, а також смуги, які належать низькочастотним неплоским внутрішньомолекулярним коливанням. Обговорюється вплив метлювання піримідинових основ по глікозидному зв'язку на їх низькочастотні спектри КР. Автори доходять висновку про перспективність використання спектроскопії КР світла на коливаннях кристалічної ґратки для вивчення структурно-динамічних властивостей твердофазних біомолекулярних комплексів.

Summary

Low-frequency ($10-15\text{ cm}^{-1} < \nu < 200\text{ cm}^{-1}$) Raman spectra of polycrystalline 1-methylcytosine, 1-methyluracil and 1-methylthymine at 300 K have been investigated in detail. The lattice vibrational modes and intramolecular out-of-plane vibrations have been identified. It has been discussed, how the low frequency Raman spectra of nucleic acid bases are affected by their methylation at the point of glycoside linkage.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Говорун Д. Н., Мищук Я. П., Желтовский Н. В.* Низкочастотные спектры КР некоторых метилзамещенных компонентов нуклеиновых кислот: 9-метилпроизводные пуриновых оснований // Биополимеры и клетка.— 1991.— 7, № 2.
2. *Lord R. C., Thomas G. J., Jr.* Raman spectral studies of nucleic acids and related molecules. I. Ribonucleic acid derivatives // Spectrochim. acta.— 1967.— 23A, N 9.— P. 2551—2591.
3. *Harada I., Lord R. C.* Low-frequency infrared and Raman spectra of some adenine and uracil crystals // Ibid.— 1970.— 26A, N 12.— P. 2305—2318.
4. *Colombo L., Kirin D.* Raman spectrum of 1-methyl-uracil single crystal. Interpretation of internal and external spectra // Ibid.— 1986.— 42A, N 4.— P. 557—565.
5. *Lewis T. P., Miles H. T., Becker D.* Infrared and Raman spectra and vibrational assignments for 1-methyluracil and isotopic derivatives // J. Phys. Chem.— 1984.— 88, N 15.— P. 3253—3260.
6. *Wojcik M. J.* Low-frequency vibrational spectra of crystalline uracil, thymine and their 1-methyl-derivatives // J. Mol. Struct.— 1988.— 189, N 1—2.— P. 239—242.
7. *Fan K., Boggs J. E.* Analysis of the vibrational spectra of 1-methyl-uracil and its isotopic derivatives by AB initio calculations // J. Mol. Struct. (Theochem).— 1986.— 139, N 2.— P. 283—303.
8. *Effect of intermolecular interactions on the infrared spectrum of 1-methyluracil / M. Szczesniak, M. J. Nowak, K. Szczepaniak, W. B. Person // Spectrochim. acta.— 1985.— 41A, N 1/2.— P. 237—250.*
9. *Малева В. Я., Станевич А. Е.* Спектры поглощения кристаллов азотистых оснований в дальней инфракрасной области // Спектроскопия твердого тела.— Л.: Наука, 1969.— Т. 4.— С. 95—100.
10. *Beetz C. P., Ascarelli G.* The low frequency vibrations of pyrimidine and purine bases // Spectrochim. acta.— 1980.— 36A, N 3.— P. 299—313.
11. *Bandekar J., Zundel G.* Normal coordinate analysis treatment on uracil in solid state // Ibid.— 1983.— 39A, N 4.— P. 343—355.
12. *Harsanyi L., Csacza P.* Theoretical force field and vibrational spectrum of uracil by the CNDO/2 force method // Acta chim. Acad. sci. Hung.— 1983.— 113, N 3.— P. 257—278.
13. *Barnes A. J., Stuckey M. A., Gall L. Le.* Nucleic acid bases studied by matrix isolation vibrational spectroscopy: uracil and deuterated uracils // Spectrochim. acta.— 1984.— 40A, N 5.— P. 419—431.
14. *Kirin D., Colombo L., Furic K.* Low-frequency vibrational spectrum of the 1-methyl-thymine single crystal // Ibid.— 1975.— 31A, N 11.— P. 1721—1727.
15. *Kyogoku Y., Higuchi S., Tsuboi M.* Infra-red absorption spectra of the single crystals of 1-methyl-thymine, 9-methyl-adenine and their 1:1 complex // Ibid.— 1967.— 23A, N 4.— P. 969—983.
16. *Csaszar P., Harsanyi L., Boggs J. E.* Vibrational frequencies and assignments for some isotopomers of uracil using a scaled ab initio force field // Int. J. Quant. Chem.— 1988.— 33, N 1.— P. 1—17.
17. *Berreby L., Freymann R.* Donneés preliminaires sur l'étude de la liaison hydrogene dans les bases azotees et les nucleosides par cryospectroscopie dans l'Infrarouge lointain // C. r. Acad. Sci.— 1971.— 272B, N 13.— P. 111—114.
18. *Говорун Д. Н., Мищук Я. П., Желтовский Н. В.* Низкочастотные фононные спектры комбинационного рассеяния света компонентов нуклеиновых кислот: пиримидиновые основания // Биополимеры и клетка.— 1990.— 6, № 3.— С. 31—39.

Ин-т молекуляр. биологии и генетики АН УССР, Киев

Получено 12.07.90