

A nukleinsavak gerjesztett állapotai

Excited states of nucleic acids

PÉTER G. Szalay

ELTE Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Intézet,
H-1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A,
peter.szalay@ttk.elte.hu

ABSTRACT

Nucleic acids, which make up DNA and RNA, are not only of interest to chemists but also raise questions for the general public regarding how they withstand sunlight and how genetic information can be protected from damage. In this presentation, I will discuss how quantum chemistry can contribute to answering these questions. First, I will demonstrate how reliable data can be obtained from quantum chemical calculations for nucleobases, with a particular focus on their excited states. Then, I will delve into the differences between the excited states of oligomers compared to monomers, discussing their various types and how aggregation affects the properties of these excited states. Finally, I will briefly discuss the strategy for accurately studying the excited states of large oligomers using quantum chemistry methods while ensuring that the accuracy of calculations is maintained, consistent with that of monomers.

Keywords: nucleic acids, quantum chemistry, excited states, oligomers

ÖSSZEFOGLALÓ

A DNS-t és RNS-t felépítő nukleinsavak nemcsak a vegyészek érdeklődésére tartanak számot, hanem a közvéleményt is foglalkoztató kérdés, hogyan állnak ezek ellen a napsugárzásnak, hogyan védhető meg a genetikai információ a károsodástól. Ebben az előadásban arról lesz szó, hogy a kvantumkémia hogyan járulhat hozzá ezeknek a kérdéseknek a megválaszolásához. Először is bemutatom, hogyan lehet megbízható adatokat nyerni a nukleobázisok kvantumkémiai számításaiból, különös tekintettel a gerjesztett állapotukra. Ezt követően tárgyalom az oligomerek és a monomerek gerjesztett állapotai közötti különbségeket, kitérek azok különböző típusaira és arra, hogy az aggregáció hogyan befolyásolja ezeknek a gerjesztett állapotoknak a tulajdonságait. Végül röviden beszélek arról, hogy milyen stratégiával lehet a nagy oligomerek gerjesztett állapotait kvantumkémiai módszerekkel tárgyalni úgy, hogy az eredmények megbízhatósága a monomerekével egyező maradjon.

Kulcsszavak: nukleinsavak, kvantumkémia, gerjesztett állapotok, oligomerek