

A.I.C.F.

4

**Associazione Italiana di Chimica
Fisica**

**XIV
Congresso
Nazionale**

**Firenze
24-26 ottobre
1979**

Riassunti

SPETTRI DI RISONANZA RAMAN DELL'ACTINOMICINA D E DEL SUO COMPLESSO
CON DNA.

G. Smulevich, L. Angeloni e M.P. Marzocchi

Istituto di Chimica Fisica dell'Università. Via G. Capponi, 9 Firenze.

I complessi di intercalazione che l'actinomicina D forma con il DNA ed altri nucleotidi, hanno suscitato notevole interesse in quanto hanno permesso di ottenere informazioni strutturali sul sito specifico legato all'attività biologica¹. Tra i vari metodi di indagine adoperati, la risonanza Raman si è rivelata una tecnica molto selettiva poichè permette di evidenziare solo i modi vibrazionali associati al cromoforo².

Con il presente lavoro si riportano i risultati ottenuti con lo studio dei profili di eccitazione Raman dell'actinomicina D e del suo complesso con il DNA. L'analisi dei dati ha permesso di proporre l'assegnamento delle vibrazioni associate al cromoforo e di stabilire l'origine degli stati elettronici. In particolare l'assorbimento complesso tra 400 e 500 nm si può attribuire alla struttura vibrazionale di un solo stato elettronico in quanto si è potuto dimostrare che l'intensità della maggior parte delle bande derivano tutte dagli integrali di sovrapposizione di Franck-Condon. Perciò i due massimi a 425 e 441 nm, osservati nello spettro visibile, appaiono dovuti a transizioni 0-1. Sempre in base all'analisi dei profili di eccitazione, considerando gli orbitali molecolari calcolati da Tai e coll.³, il numero e la frequenza delle bande Raman osservate, siamo stati in grado di dare l'assegnamento vibrazionale della porzione del cromoforo interessata nella transizione elettronica.

Gli spettri Raman del complesso actinomicina D-DNA non mostrano alcuna variazione nella frequenza delle bande, rispetto al cromofoforo puro, ma differiscono essenzialmente per la scomparsa della banda più intensa. Nello spettro elettronico invece i due massimi subiscono uno shift di frequenza e una diminuzione di intensità, ma i profili di eccitazione mantengono la stessa dipendenza dai fattori di Franck-Condon seguendo semplicemente lo spostamento dei massimi di assorbimento.

Grazie a questi dati, in funzione dell'assegnamento vibrazionale proposto e tenendo presente la teoria dell'ipocromismo⁴ che vede tale effetto dovuto all'interazione di stacking, si può pensare che nella formazione del complesso farmaco-acido nucleico si instauri una interazione specifica con l'azoto eterociclico dell'actinomicina D.

Bibliografia.

- 1) H.M. Sobell e S.C. Jain; J. Mol. Biol. 68 (1972) 21.
- 2) B.B. Johnson e W.L. Peticolas; Annu. Rev. Phys. Chem. 27 (1976) 465.
- 3) T.C. Tai, N.S. Craig e B.P. Gaber; J. Am. Chem. Soc. 98 (1976) 7925.
- 4) H. DeVoe e I. Tinoco Jr; J. Mol. Biol. 4 (1962) 518.