

## ЗА ЯКИХ УМОВ ВОТСОН-КРИКІВСЬКА ПАРА ОСНОВ ДНК G-C НАБУВАЄ ВСІХ ЧОТИРЬОХ КОНФІГУРАЦІЙ, ХАРАКТЕРНИХ ДЛЯ ВОТСОН-КРИКІВСЬКОЇ ПАРИ ОСНОВ ДНК A-T?

О. О. БРОВАРЕЦЬ

*Інститут молекулярної біології і генетики НАН України, Київ;  
Науково-навчальний центр «Державна ключова лабораторія молекулярної  
і клітинної біології», Київ, Україна;*

*Інститут високих технологій Київського національного університету  
імені Тараса Шевченка, Україна;  
e-mail: brovarets@list.ru*

*На рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) вперше показано, що льовдінівська пара основ G\*.C\* L, утворена мутагенними таутомерами, може набувати, як і вотсон-криківська пара основ ДНК A-T, чотирьох біологічно важливих конфігурацій, а саме: вотсон-криківської, оберненої вотсон-криківської, гугстинівської і оберненої гугстинівської. Цей факт демонструє доволі неочікувану роль таутомеризації однієї із вотсон-криківських пар основ ДНК, зокрема подвійним перенесенням протону: саме таутомеризація G.C → G\*.C\* дозволяє подолати стеричні перепони для реалізації вищезгаданих конфігурацій. Обговорюються геометричні, електронно-топологічні та енергетичні характеристики H-зв'язків, що стабілізують досліджені пари, а також енергетичні характеристики останніх.*

*Ключові слова: пара основ G-C; таутомеризація; квантово-хімічні розрахунки; міжмолекулярні водневі зв'язки; топологія електронної густини.*

**В**ідомо, що вотсон-криківська пара основ аденін-тимін (A-T WC) [1], що стабілізується трьома кооперативними [2] міжмолекулярними H-зв'язками N6H...O4, N3H...N1 і C2H...O2 [3, 4], які взаємно посилюють один одного [5], може набувати ще трьох воднево-зв'язаних конфігурацій, а саме— A-T rWC [6], A-T H [7–11] і A-T rH [12, 13]. Усі ці чотири конфігурації пари A-T є біологічно важливими. Так, вотсон-криківська схема спарювання реалізується в антипаралельних ланцюгах подвійної правозакрученої спіралі ДНК [1], обернена вотсон-криківська пара основ (A-T rWC), утворена обертанням однієї основи навколо іншої на 180°, спостерігається у ДНК з паралельними ланцюгами [6]. Гугстинівська [11] пара основ (A-T H) виконує чимало біологічних функцій: її зафіксовано в численних молекулярних процесах, які відбуваються в ядрі клітини та асистують експресію генів, реплікацію, рекомбінацію та підтримання довжини теломер [7–10]. Обернена гугстинівська пара основ (A-T rH) [13] утворюється повертанням однієї основи на 180° відносно іншої — вона, зокрема, виявлена в комплексах ДНК з лікарськими препаратами [8], у протеїново-нуклеїнових комплексах [9, 10] та у складі РНК [12].

Водночас геометрична будова вотсон-криківської пари гуанін-цитозин в основному таутомерному стані (G-C WC) не допускає утворення подібних конфігурацій через стеричні перепони. Виникає цілком закономірне питання: а чи не подбала Природа про те, аби ці стеричні ускладнення можна було у той чи інший фізико-хімічний спосіб усувати, наближаючи таким чином конфігураційні властивості пари G-C до аналогічних біологічно важливих властивостей пари A-T?

Основна ідея цієї роботи полягає в тому, аби показати, що необхідною і достатньою умовою переходу пари G-C WC у стандартні конфігурації, характерні для пари A-T, є її таутомеризація у льовдінівську пару G\*.C\* L з вотсон-криківською геометрією [14, 15], утворену мутагенними таутомерами (позначені зірочками) [14–16]. Нижче наводяться квантово-хімічні підтвердження цієї гіпотези.

### Матеріали і методи

Об'єктами дослідження слугували вотсон-криківська пара основ ДНК G-C WC [1], льовдінівська пара основ ДНК G\*.C\* L [14, 15], утворена мутагенними таутомерами [16], обернена льовдінівська G\*.C\* rL [6], гугстинівська

$G^*C^*H$  [11] та обернена гугстинівська  $G^*C^*gH$  [13] пари основ.

*Предмет дослідження* – з'ясування необхідних структурних передумов, за яких вотсон-криківська пара основ ДНК  $G-C WC$  може набувати усіх чотирьох біологічно важливих конфігурацій, характерних для вотсон-криківської пари  $A-T WC$ .

Квантово-хімічне дослідження геометричної та електронної будови структур, що вивчалися, проведено на рівні теорії DFT  $V3LYP/6-311++G(d,p)$  у вільному стані [17–19]. Усі зоптимізовані пари перевірено на стійкість за відсутністю уявних частот в їхніх коливальних спектрах, розрахованих у гармонійному наближенні [20, 21]. При цьому для частот використано масштабуючий множник 0,9668 [21]. Енергію Гіббса (за нормальних умов) та електронну енергію взаємодії в парах основ ДНК визначали на рівні теорії  $MP2/6-311++G(2df,pd)//V3LYP/6-311++G(d,p)$  [22, 23] з урахуванням так званої BSSE-поправки на базисний набір функцій [32]. Усі квантово-хімічні розрахунки проведено із використанням програмного пакета «Gaussian'09» [33].

Розподіл електронної густини у досліджуваних парах основ аналізували, використовуючи теорію Бейдера «Атомів у молекулах» [34] та хвильові функції, отримані на рівні теорії  $V3LYP/6-311++G(d,p)$ . Міжмолекулярні  $H$ -зв'язки ідентифікували за наявністю критичної точки (3, -1) між двома валентно незв'язаними атомами [25, 26]. Топологію електронної густини аналізували за допомогою програмного пакету AIM2000 [35], використовуючи стандартні опції [27, 28].

Енергію канонічних  $O/NH...O/N$   $H$ -зв'язків визначали, як у роботах [29, 30], за формулою Йогансена [36]:

$$E_{HB} = 0,33 \cdot \sqrt{\Delta\nu - 40},$$

де  $\Delta\nu$  – величина зсуву частоти валентного коливання водневозв'язаної групи  $AH$  у разі утворення  $H$ -зв'язку  $AH...B$  ( $A$  та  $B$  –  $N$ ,  $O$ ). Для усунення коливальних резонансів застосовували часткове дейтерування [25, 26].

Енергію неканонічних [24]  $H$ -зв'язків  $C8H...O2/N4$  розраховували за формулою Еспінози–Молінса–Лекомте [37], базуючись на розподілі електронної густини у критичній точці (3, -1)  $H$ -зв'язку [30]:

$$E_{HB} = 0,5 \cdot V(r),$$

де  $V(r)$  – значення локальної потенційної енергії в критичній точці (3, -1)  $H$ -зв'язку.

Використано стандартну нумерацію атомів основ ДНК  $G$  і  $C$  [38].

## Результати та обговорення

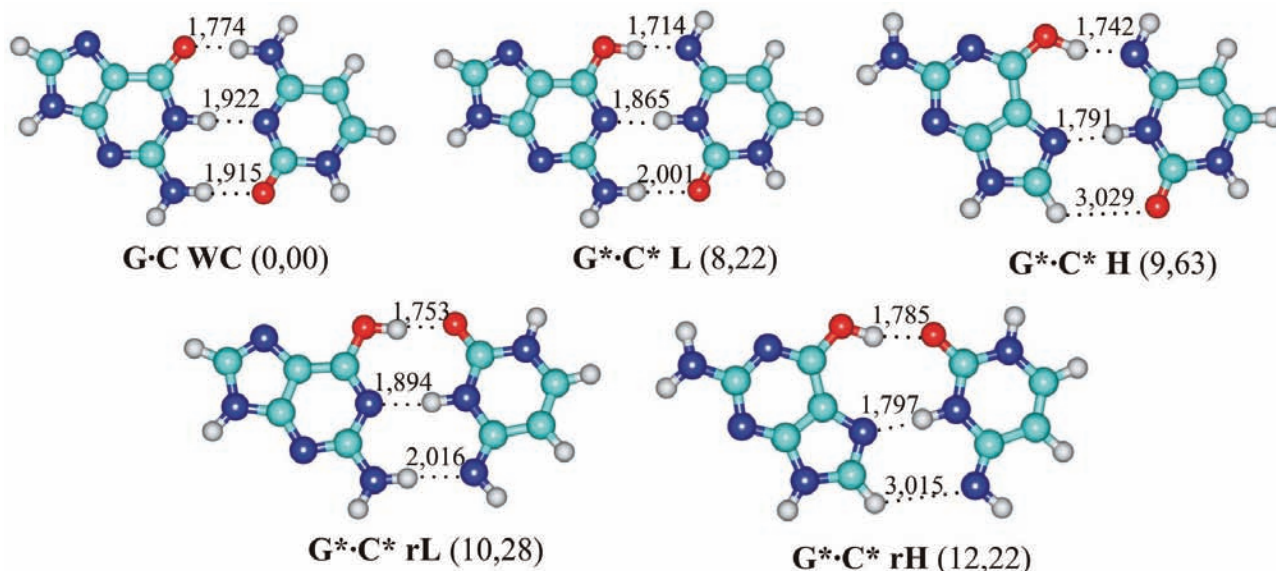
Ретельним аналізом гіперповерхні потенціальної (електронної) енергії нам вперше вдалося показати, що вотсон-криківська пара основ ДНК  $G-C WC$  може набувати конфігурацій, характерних для вотсон-криківської пари основ  $A-T$ , лише за умов її таутомеризації подвійним перенесенням протону у так звану льовдінівську пару  $G^*C^*L$  [14, 15] з вотсон-криківською геометрією, утворену мутагенними таутомерами [16].

Пари основ ДНК, що мають вотсон-криківську геометрію ( $G-C WC$ ,  $G^*C^*L$  та  $G^*C^*gL$ ), стабілізуються трьома міжмолекулярними канонічними  $H$ -зв'язками, в той час як пари основ у гугстинівській конфігурації ( $G^*C^*H$  і  $G^*C^*gH$ ) [11, 13], – двома канонічними і одним неканонічним [24]  $H$ -зв'язком  $C8H...O2/N4$  (рис., табл. 1). Їхні геометричні, електронно-топологічні, коливальні та енергетичні характеристики наведено у табл. 1.

Для усіх  $H$ -зв'язків спостерігається додатне значення лапласіана електронної густини  $\Delta\rho$  в критичній точці (3, -1)  $H$ -зв'язку  $AH...B$ , при цьому його значення знаходиться в межах  $0,012 \div 0,124$  ат.од. В той самий час значення електронної густини  $\rho$ , яка зазвичай розглядається як міра міцності  $H$ -зв'язування [34], лежить у діапазоні  $0,003 \div 0,051$  ат.од. Отже, найслабшим з-поміж усіх зафіксованих є неканонічний  $H$ -зв'язок  $C8H...O2$  (0,55 ккал/моль) у парі основ  $G^*C^*H$ , водночас найсильнішим є канонічний  $H$ -зв'язок  $O6H...N4$  (8,77 ккал/моль) у парі основ  $G^*C^*L$ . Слід зауважити, що найменше значення еліптичності  $1,73 \cdot 10^{-2}$  спостерігається для неканонічного  $H$ -зв'язку  $C8H...O2$  у парі  $G^*C^*H$ . Ці результати узгоджуються з відомими даними літератури [16, 24] (табл. 1).

Усі ідентифіковані  $H$ -зв'язки задовольняють геометричним критеріям  $H$ -зв'язування: відстані  $d_{H...B}$  менші, ніж сума ван-дер-ваальсових радіусів Бонді [39] (для атомів водню  $H$  (1,20 Å), кисню  $O$  (1,52 Å) і азоту  $N$  (1,55 Å)) та лежать у межах 1,714 Å ( $H$ -зв'язок  $O6H...N4$  в льовдінівській парі основ  $G^*C^*L$ )  $\div$  3,681 Å ( $H$ -зв'язок  $C8H...N4$  в оберненій гугстинівській парі основ  $G^*C^*gH$ ). Кути  $H$ -зв'язування розміщуються в діапазоні  $118,9^\circ$  ( $H$ -зв'язок  $C8H...O2$  у парі основ  $G^*C^*H$ )  $\div$   $180,0^\circ$  ( $H$ -зв'язок  $N3H...N7$  у тій самій парі основ) (табл. 1).

Видовження донорної групи  $AH$  за утворення  $H$ -зв'язку  $d_{AH}$  доданок в усіх без винятку випадках та знаходиться в межах



Геометрична будова досліджуваних пар за участю основ ДНК G і C та їхніх мутагенних таутомерів G\* і C\*, одержана на рівні теорії B3LYP/6-311++G(d,p) у вільному стані. Пунктиром позначено Н-зв'язки АН...В: їхні довжини Н...В подано в Å. Біля кожної структури в дужках вказано її відносну енергію Гіббса в ккал/моль за стандартних умов (див. також табл. 1 і 2)

Таблиця 1. Геометричні, електронно-топологічні, спектрально-коливальні та енергетичні характеристики міжмолекулярних водневих зв'язків у досліджених парах за участю основ ДНК G і C та їхніх мутагенних таутомерів G\* і C\*. Розрахунок на рівні теорії B3LYP/6-311++G(d,p) у вільному стані

Пари основ ДНК	Н-зв'язок АН...В	$d_{A...B}$ , Å	$d_{H...B}$ , Å	$\angle AN...B$ , град.	$\Delta d_{AH}$ , Å	$\rho$ , ат.од.	$\Delta\rho$ , ат.од.	100· $\epsilon$	$-\Delta\nu$ , см <sup>-1</sup>	$E_{HB}$ , ккал/моль
G·C WC	N4H...O6	2,809	1,774	178,8	0,027	0,037	0,120	3,71	457,4	6,74
	N1H...N3	2,954	1,922	177,1	0,020	0,033	0,088	6,93	363,1	5,93
	N2H...O2	2,936	1,915	178,4	0,012	0,027	0,094	5,77	213,7	4,35
G*·C* L	O6H...N4	2,720	1,714	172,1	0,038	0,051	0,103	5,27	745,6	8,77
	N3H...N1	2,910	1,865	176,7	0,034	0,038	0,089	6,36	595,4	7,78
	N2H...O2	3,014	2,001	177,3	0,007	0,022	0,080	5,73	132,8	3,18
G*·C* H	O6H...N4	2,710	1,742	160,7	0,036	0,047	0,102	4,88	691,6	8,42
	N3H...N7	2,834	1,791	180,0	0,032	0,043	0,101	5,68	572,6	7,62
	C8H...O2	3,675	3,029	118,9	0,0002	0,003	0,012	1,73	-4,1	0,55
G*·C* rL	O6H...O2	2,731	1,753	171,1	0,018	0,038	0,124	3,31	359,4	5,90
	N3H...N1	2,932	1,894	173,6	0,031	0,035	0,086	6,32	538,2	7,37
	N2H...N4	3,036	2,016	178,0	0,013	0,026	0,077	8,04	248,9	4,77
G*·C* rH	O6H...O2	2,733	1,785	160,6	0,016	0,034	0,120	2,25	319,0	5,51
	N3H...N7	2,838	1,797	176,3	0,030	0,042	0,101	2,73	535,6	7,35
	C8H...N4	3,681	3,015	120,4	0,0005	0,004	0,013	3,58	-2,1	0,63

Примітка:  $d_{A...B}$  та  $d_{H...B}$  – відстань між атомами А і В та Н і В відповідно, які беруть участь у Н-зв'язку АН...В;  $\angle AN...B$  – кут Н-зв'язування;  $\Delta d_{AH}$  – подовження хімічного зв'язку АН у разі утворення Н-зв'язку АН...В;  $\rho$  і  $\Delta\rho$  – значення електронної густини і лапласіана електронної густини в критичній точці відповідно;  $\epsilon$  – еліптичність;  $-\Delta\nu$  – зсув частоти валентного коливання  $\nu(AN)$  за втягування групи АН у Н-зв'язок АН...В;  $E_{HB}$  – енергія Н-зв'язку, розрахована за формулою Йогансена [36] або Еспінози–Молінса–Лекомте [37].

Таблиця 2. Енергетичні характеристики (в ккал/моль за стандартних умов) досліджених пар за участю основ ДНК G і C та їхніх мутагенних таутомерів G\* і C\*. Розрахунок на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) у вільному стані

Пари основ ДНК	$\Delta E$	$\Delta G$	$-\Delta G_{\text{int}}$	$-\Delta E_{\text{int}}$	$\sum E_{\text{HB}}$	$-\frac{\sum E_{\text{HB}}}{E_{\text{int}}}, \%$
G·C WC	0,00	0,00	15,97	29,28	17,02	58,1
G*.C* L	7,87	8,22	10,09	22,94	19,72	86,0
G*.C* H	9,79	9,63	8,91	21,24	16,59	78,1
G*.C* rL	9,92	10,28	7,35	20,21	18,03	89,2
G*.C* rH	12,51	12,22	5,42	17,63	13,49	76,5

Позначення:  $\Delta E$  – відносна електронна енергія;  $\Delta G$  – відносна енергія Гіббса (за нормальних умов);  $-\Delta G_{\text{int}}$  – енергія Гіббса взаємодії основ у парі;  $-\Delta E_{\text{int}}$  – електронна енергія взаємодії основ у парі;  $\sum E_{\text{HB}}$  – сумарна енергія трьох міжмолекулярних Н-зв'язків пари основ ДНК (див. також табл. 1).

0,0002–0,038 Å. При цьому його мінімальне значення спостерігається для Н-зв'язку C8H...O2 у парі G\*.C\* H (0,0002 Å), а максимальне – для Н-зв'язку ОбН...N4 у парі G\*.C\* L (0,038 Å) (табл. 1).

Спектроскопічні характеристики Н-зв'язків добре узгоджуються з геометричними даними. Зсув частоти валентного коливання донорної групи АН  $\nu(\text{АН})$  додатній за Н-зв'язування (зсув у червону ділянку спектра) для усіх канонічних Н-зв'язків; для неканонічних Н-зв'язків C8H...O2 та C8H...N4 зафіксовано «блакитний зсув» частоти валентного коливання  $\nu(\text{СН})$  (табл. 1). Незважаючи на «блакитний зсув» частоти коливальної моди  $\nu(\text{С8Н})$  у разі утворення Н-зв'язків C8H...O2/N4, зростання частоти (на 13,6 та 16,0  $\text{см}^{-1}$  для C8H...O2 та C8H...N4 Н-зв'язків відповідно) та інтенсивності (в 1,3 та 1,7 раза для C8H...O2 та C8H...N4 Н-зв'язків відповідно) неплосинного коливання групи СН  $\gamma(\text{СН})$  за утворення Н-зв'язку, свідчить про те, що неканонічні контакти [24] C8H...O2 та C8H...N4 є справжніми Н-зв'язками.

Слід зазначити, що усі досліджені нами пари основ ДНК є термодинамічно стійкими структурами:  $\Delta G_{\text{int}} < 0$ . Відзначимо, що найбільшу електронну енергію зв'язування має канонічна вотсон-криківська пара G·C WC ( $\Delta E_{\text{int}} = -29,28$  ккал/моль), а найменшу – G\*.C\* rH ( $\Delta E_{\text{int}} = -17,63$  ккал/моль) (табл. 2).

Насамкінець зауважимо, що в усіх досліджених нами структурах внесок сумарної енергії Н-зв'язків в електронну енергію їх стабілізації лежить у межах 58,1–89,2% (табл. 2). Це означає, що не лише Н-зв'язування, а й інші типи міжмолекулярних взаємодій [40]

роблять істотний внесок в електронну енергію зв'язування досліджених пар основ ДНК.

Таким чином, вперше показано, що льовдінівська пара G\*.C\* L [14, 15], утворена мутагенними таутомерами [16, 22], може набувати, як і вотсон-криківська пара основ ДНК АТ чотирьох біологічно важливих конфігурацій, а саме – вотсон-криківської, оберненої вотсон-криківської, гугстинівської і оберненої гугстинівської. Цей факт демонструє доволі неочікувану роль таутомеризації однієї із вотсон-криківських пар основ ДНК, зокрема подвійним перенесенням протона: саме таутомеризація G·C → G\*.C\* дозволяє подолати стеричні перепони для реалізації вищезгаданих конфігурацій. Представлено геометричні, електронно-топологічні та енергетичні характеристики Н-зв'язків, що стабілізують досліджені пари, та енергетичні характеристики останніх.

*Насамкінець висловлюю щирю вдячність проф. Говоруну Д. М. за увагу до роботи, а також Інформаційно-обчислювальному центру Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, НТК «Інститут монокристалів» НАН України та Інституту сцинтиляційних матеріалів НАН України за люб'язно надані обчислювальні ресурси у складі Українського національного Грід у та програмне забезпечення. Роботу виконано за підтримки гранта Президента України для обдарованої молоді на 2012 рік (договір № 30/2012) та гранта Президента України для підтримки наукових досліджень молодих учених на 2012 рік (договір № 44/400-2012, проект № GP/F44/086).*

**ПРИ КАКИХ УСЛОВИЯХ УОТСОН-КРИКОВСКАЯ ПАРА ОСНОВАНИЙ ДНК G·C ПРИОБРЕТАЕТ ЧЕТЫРЕ КОНФИГУРАЦИИ, ХАРАКТЕРНЫЕ ДЛЯ УОТСОН-КРИКОВСКОЙ ПАРЫ ОСНОВАНИЙ ДНК A·T?**

*О. А. Броварец*

Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины, Киев; Научно-учебный центр «Государственная ключевая лаборатория молекулярной и клеточной биологии», Киев, Украина; Институт высоких технологий Киевского национального университета имени Тараса Шевченко, Украина; e-mail: brovarets@list.ru

На уровне теории MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) впервые показано, что левдиновская пара оснований G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> L, образованная мутагенными таутомерами, может принимать, как и уотсон-криковская пара оснований ДНК A·T, четыре биологически важные конфигурации, а именно: уотсон-криковскую, обратную уотсон-криковскую, хугстиновскую и обратную хугстиновскую. Этот факт демонстрирует довольно неожиданную роль таутомеризации одной из уотсон-криковских пар оснований ДНК, в частности двойным переносом протона: именно таутомеризация G·C→G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> позволяет преодолеть стерические препятствия для реализации вышеуказанных конфигураций. Обсуждаются геометрические, электронно-топологические и энергетические характеристики H-связей, стабилизирующие исследованные пары, а также энергетические характеристики последних.

**Ключевые слова:** пара оснований G·C; таутомеризация; квантово-химические расчеты; межмолекулярные водородные связи; топология электронной плотности.

**UNDER WHAT CONDITIONS DOES G·C WATSON-CRICK DNA BASE PAIR ACQUIRE ALL FOUR CONFIGURATIONS CHARACTERISTIC FOR A·T WATSON-CRICK DNA BASE PAIR?**

*O. O. Brovarets'*

Institute of Molecular Biology and Genetics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv; Research and Educational Center "State Key Laboratory of Molecular and Cell Biology", Kyiv, Ukraine; Institute of High Technologies, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine; e-mail: brovarets@list.ru

At the MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory it was established for the first time, that the Löwdin's G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> DNA base pair formed by the mutagenic tautomers can acquire, as the A·T Watson-Crick DNA base pair, four biologically important configurations, namely: Watson-Crick, reverse Watson-Crick, Hoogsteen and reverse Hoogsteen. This fact demonstrates rather unexpected role of the tautomerisation of the one of the Watson-Crick DNA base pairs, in particular, *via* double proton transfer: exactly the G·C→G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> tautomerisation allows to overcome steric hindrances for the implementation of the above mentioned configurations. Geometric, electron-topological and energetic properties of the H-bonds that stabilise the studied pairs, as well as the energetic characteristics of the latter are presented.

**Key words:** G·C base pair; tautomerisation; quantum-chemical calculations; intermolecular hydrogen bonds; topology of the electron density.

1. *Watson J. D., Crick F. H. C.* // *Nature.* — 1953. — **171**, N 4361. — P. 964–967.

2. Mishchuk Ya. R., Potyagaylo A. L., Hovorun D. M. // *J. Mol. Struct.* – 2000. – **552**, N 1–3. – P. 283–289.
3. Brovarets' O. O., Yurenko Y. P., Dubey I. Ya., Hovorun D. M. // *J. Biomol. Struct. Dynam.* – 2012. – **29**, N 6. – P. 1101–1109.
4. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // *J. Biomol. Struct. Dynam.* – 2012. DOI: 10.1080/07391102.2012.755795.
5. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // *J. Biomol. Struct. Dynam.* – 2013. DOI:10.1080/07391102.2012.715041.
6. Tchurikov N. A., Chistyakova L. G., Zavilgel'sky G. B. et al. // *J. Biol. Chem.* – 2000. – **275**, N 34. – P. 26523–26529.
7. Ghosal G., Muniyappa K. // *Biochem. Biophys. Res. Commun.* – 2006. – **343**, N 1. – P. 1–7.
8. Seaman F. C., Hurley L. // *Biochemistry.* – 1993. – **32**, N 47. – P. 12577–12585.
9. Aishima J., Gitti R. K., Noah J. E. et al. // *Nucl. Acids Res.* – 2002. – **30**, N 23. – P. 5244–5252.
10. Nikolova E. N., Kim E., Wise A. A. et al. // *Nature.* – 2011. – **470**, N 7335. – P. 498–502.
11. Hoogsteen K. // *Acta Crystallog.* – 1963. – **16**. – P. 907–916.
12. Zagryadskaya E. I., Doyon F. R., Steinberg S. V. // *Nucl. Acids Res.* – 2003. – **31**, N 14. – P. 3946–3953.
13. Haschemeyer A. E. V., Sobell H. M. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.* – 1963. – **50**, N 5. – P. 872–877.
14. Löwdin P.-O. // *Rev. Mod. Phys.* – 1963. – **35**, N 3. – P.724–732.
15. Löwdin P.-O. // *Adv. Quant. Chem.* – 1966. – **2**. – P. 213–360.
16. Brovarets' O. O., Kolomiets' I. M., Hovorun D. M. / In Tomofumi Tada (Ed.), *Quantum chemistry – molecules for innovations.* – Rijeka: In Tech Open Access, 2012. – P. 59–102.
17. Kondratyuk I. V., Samijlenko S. P., Kolomiets' I. M., Hovorun D. M. // *J. Mol. Struct.* – 2000. – **523**, N 1–3. – P. 109–118.
18. Pelmeshnikov A., Hovorun D. M., Shishkin O. V., Leszczynski J. // *J. Chem. Phys.* – 2000. – **113**, N 14. – P. 5986–5990.
19. Shishkin O. V., Pelmeshnikov A., Hovorun D. M., Leszczynski J. // *Chem. Phys.* – 2000. – **260**, N 3. – P. 317–325.
20. Samijlenko S. P., Krechkivska O. M., Kosach D. A., Hovorun D. M. // *J. Mol. Struct.* – 2004. – **708**, N 1–3. – P. 97–104.
21. Platonov M. O., Samijlenko S. P., Sudakov O. O. et al. // *Spectrochim. Acta Part A.* – 2005. – **62**, N 1–3. – P. 112–114.
22. Danilov V. I., Anisimov V. M., Kurita N., Hovorun D. // *Chem. Phys. Lett.* – 2005. – **412**, N 4–6. – P. 285–293.
23. Danilov V. I., van Mourik T., Kurita N. et al. // *J. Phys. Chem.* – 2009. – **113**, N 11. – P. 2233–2235.
24. Yurenko Y. P., Zhurakivsky R. O., Samijlenko S. P., Hovorun D. M. // *J. Biomol. Struct. Dynam.* – 2011. – **29**, N 1. – P. 51–65.
25. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // *Biopolym. Cell.* – 2010. – **26**, N 1. – P. 72–76.
26. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // *Biopolym. Cell.* – 2010. – **26**, N 4. – P. 295–298.
27. Brovarets' O. O., Zhurakivsky R. O., Hovorun D. M. // *Biopolym. Cell.* – 2010. – **26**, N 5. – P. 398–405.
28. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // *Biopolym. Cell.* – 2011. – **27**, N 3. – P. 221–230.
29. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // *Opt. Spectrosc.* – 2011. – **111**, N 5. – P. 750–757.
30. Brovarets' O. O., Zhurakivsky R. O., Hovorun D. M. // *J. Mol. Model.* – 2013. DOI: 10.1007/s00894-012-1720-9.
31. Hovorun D. M., Gorb L., Leszczynski J. // *Int. J. Quantum Chem.* – 1999. – **75**, N 3. – P. 245–253.
32. Boys S.F., Bernardi F. // *Mol. Phys.* – 1970. – **19**, N 4. – P. 553–566.
33. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. *Gaussian 09 (Revision B.01).* – Wallingford CT: Gaussian Inc., 2010.
34. Bader R. W. F. *Atoms in molecules. A quantum theory.* – Oxford: Clarendon Press, 1990. – 436 p.
35. Keith T. A. AIMAll (Version 11.12.19). – 2011. Retrieved from <http://aim.tkgristmill.com>.
36. Iogansen A. V. // *Spectrochim. Acta Part A.* – 1999. – **55**, N 7–8. – P. 1585–1612.
37. Espinosa E., Molins E., Lecomte C. // *Chem. Phys. Lett.* – 1998. – **285**, N 3–4. – P. 170–173.
38. Saenger W. *Principles of nucleic acid structure.* – New York: Springer, 1984. – 556 p.
39. Bondi A. J. // *J. Phys. Chem.* – 1964. – **68**, N 3. – P. 441–451.
40. Kaplan I. *Intermolecular interactions: Physical picture, computational methods and model potentials.* – Chichester: John Wiley & Sons Ltd., 2006. – 367 p.

Отримано 06.03.2013