

**СТРУКТУРНО-ЕНЕРГЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ЧОТИРЬОХ  
КОНФІГУРАЦІЙ ПАР ОСНОВ ДНК А·Т І G·C**

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*

*Методами неемпіричної квантової хімії на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) вперше показано, що гугстинівська, обернена гугстинівська, вотсон-криківська і обернена вотсон-криківська конфігурації пар основ ДНК А·Т і G·C є ізоелектронними та ізоморфними структурами з близькими динамічними властивостями. Спираючись на ці результати, постульовано неіонізаційний механізм «дихання» пари основ ДНК G·C за Гугстином, а саме – перетворення таутомеризованої (льовдінівської) пари G\*·C\*, яка має вотсон-криківську геометрію, в гугстинівську електронейтральну пару G\*·C\* Н, яка стабілізується трьома Н-зв'язками ОбН...N4, N3Н...N7 і С8Н...O2. Припускається, що такий сценарій розвитку подій спрацьовує в тому разі, коли ДНК знаходиться не у водному розчині, а функціонує разом із протейнами і протонування цитозину за атомом N3 унеможливлене.*

*Ключові слова:* вотсон-криківська, обернена вотсон-криківська, гугстинівська і обернена гугстинівська пари основ ДНК А·Т; «дихання» пари основ ДНК G·C за Гугстином; міжмолекулярні водневі зв'язки; квантово-хімічні розрахунки; аналіз топології електронної густини.

З використанням новітніх методів неемпіричної квантової хімії нами вперше було встановлено, що льовдінівська пара G\*·C\* L [1, 2], утворена мутагенними таутомерами, може набувати, як і вотсон-криківська пара основ ДНК А·Т [3], чотирьох біологічно важливих конфігурацій, а саме – вотсон-криківської (WC) [3], оберненої вотсон-криківської (rWC) [4], гугстинівської (H) [5] і оберненої гугстинівської (rH) [6]. 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.

Ця стаття є логічним продовженням наших досліджень – вона присвячена порівняльному квантово-хімічному аналізу структурно-енергетичних властивостей чотирьох конфігурацій пар основ ДНК А·Т і G·C. Інтерес до цієї тематики «підігрітий» роботою [7], результати якої справили ефект «бомби, що вибухнула» [8], бо переконливо як експериментально, так і теоретично було продемонстровано, що комплементарні пари основ ДНК у водному

розчині «дихають за Гугстином» [8]. Її автори дійшли висновку, що пари А·Т і G·C «дихають» по-різному – перша за молекулярним механізмом, а друга – за іонізаційним, який передбачає захоплення цитозинном протону із середовища у положення N3.

Нижче нами запропоновано молекулярний механізм перетворення вотсон-криківської пари G·C в електронейтральну гугстинівську пару G\*·C\* Н, який потребує таутомеризації пари G·C, а не її протонування. Коротко аналізуються умови, за яких реалізується цей сценарій розвитку подій.

**Матеріали і методи**

Об'єктами дослідження слугували вотсон-криківська А·Т WC [3], обернена вотсон-криківська А·Т rWC [4], гугстинівська А·Т H [5] та обернена гугстинівська А·Т rH [6] пари основ ДНК.

Предмет дослідження – структурно-енергетичні властивості щойно перелічених пар та їх порівняння з такими самими властивостями аналогічних пар, утворених основами G та C та їхніми рідкісними таутомерами [9–11].

Квантово-хімічні розрахунки геометричної та електронної будови досліджуваних структур проведено на рівні теорії DFT B3LYP/6-311++G(d,p) у вільному стані [12, 13]. Усі зоптимізовані структури перевірено на стійкість за відсутністю уявних частот в їхніх коливальних спектрах, розрахованих у гармонійному наближенні [14–16]. Для частот коливань використано масштабуючий множник 0,9668 [17–19]. Енергію Гіббса (за нормальних умов) та енергію взаємодії в парах основ визначали на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) [16–18] з урахуванням так званої BSSE-поправки на базисний набір функцій [27]. Усі квантово-хімічні розрахунки проведено з використанням програмного пакета «GAUSSIAN'09» [28].

Розподіл електронної густини в досліджуваних парах основ аналізували, використовуючи теорію Бейдера «Атомів у молекулах» [29] та хвильові функції, отримані на рівні теорії B3LYP/6-311++G(d,p). Міжмолекулярні Н-зв'язки ідентифікували за наявністю критичної точки (3, -1) між двома валентно незв'язаними атомами. Топологію електронної густини аналізували за допомогою програмного пакета AIM2000 [30], використовуючи стандартні опції.

Енергію канонічних [20–23] O/NH...O/N Н-зв'язків визначали за формулою Йогансена [31]:

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

де  $\Delta\nu$  – величина зсуву валентних коливань  $\nu(\text{АН})$  групи АН за утворення Н-зв'язку АН...В (А та В – N, O). Для усунення коливальних резонансів застосовували часткове дейтерування [24–26].

Енергію неканонічних [24] СН...О Н-зв'язків розраховували за формулою Еспінози–Молінса–Лекомте [32]:

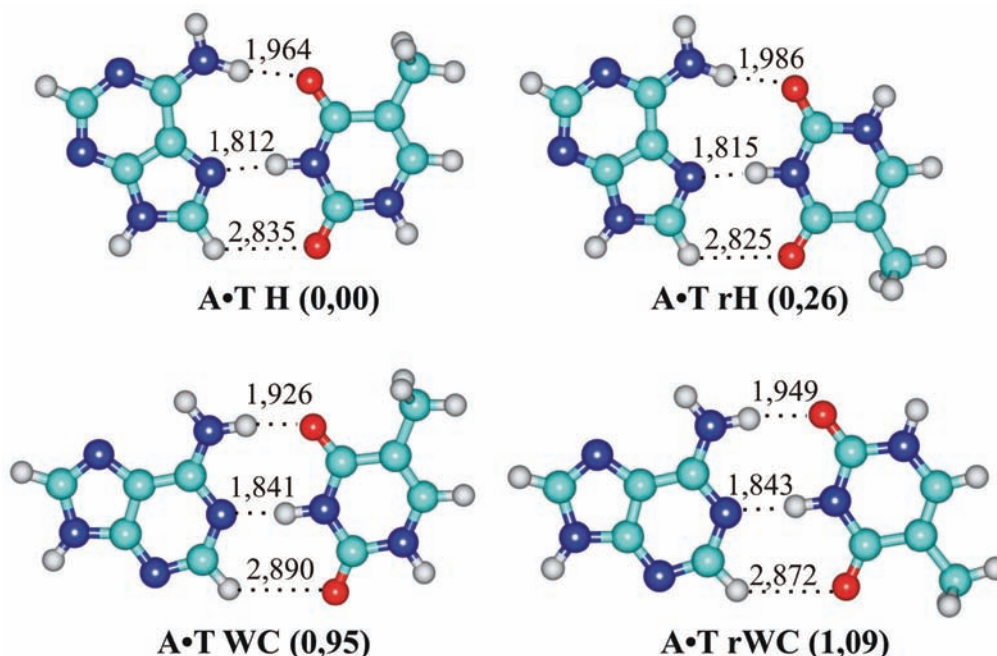
$$E_{\text{HB}} = 0,5 \cdot V(r),$$

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

Використано стандартну нумерацію атомів основ ДНК [33].

### Результати та обговорення

Як і вотсон-криківська пара основ ДНК G-C за умови її таутомерного перетворення  $G-C \rightarrow G^*C^*$ , вотсон-криківська пара основ ДНК А-Т може набувати чотирьох аналогічних конфігурацій, а саме – вотсон-криківської А-Т WC [3], оберненої вотсон-криківської А-Т rWC [4], гугстинівської А-Т Н [5] та



Геометрична будова досліджуваних пар основ ДНК, одержана на рівні теорії B3LYP/6-311++G(d,p) в ізолюваному 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 та 2)

Таблиця 1. Електронно-топологічні, геометричні, спектрально-коливальні та енергетичні характеристики міжмолекулярних водневих зв'язків у досліджених парах основ ДНК за участю А і Т (див. також рисунок)

Конфігурація пари АТ	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
АТ Н	N6H...O4	2,972	1,963	170,6	0,012	0,023	0,086	3,93	200,1	4,18
	N3H...N7	2,853	1,812	175,9	0,031	0,041	0,099	5,75	541,4	7,39
	C8H...O2	3,524	2,835	121,7	0,0003	0,005	0,016	7,71	-2,0	0,83
АТ гН	N6H...O2	2,994	1,986	170,9	0,011	0,022	0,082	4,95	179,9	3,90
	N3H...N7	2,856	1,815	176,9	0,030	0,041	0,099	5,80	535,1	7,34
	C8H...O4	3,517	2,825	121,9	0,0005	0,005	0,017	7,97	-2,1	0,86
АТ WC	N6H...O4	2,946	1,926	173,5	0,014	0,026	0,093	4,39	240,8	4,68
	N3H...N1	2,886	1,841	178,8	0,032	0,040	0,093	6,49	572,7	7,62
	C2H...O2	3,975	2,890	132,3	0,0002	0,004	0,014	3,40	-4,9	0,74
АТ гWC	N6H...O2	2,962	1,949	172,9	0,013	0,024	0,088	5,26	216,0	4,38
	N3H...N1	2,887	1,843	177,7	0,032	0,039	0,093	6,51	562,9	7,55
	C2H...O4	3,696	2,872	132,8	0,0002	0,004	0,014	3,32	-5,4	0,77

Позначення:  $d_{A...B}$ ,  $d_{H...B}$  – відстані 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 за утворення Н-зв'язку АН...В;  $\rho$  і  $\Delta\rho$  – значення електронної густини і лапласіану електронної густини в критичній точці (3, -1) відповідно;  $\epsilon$  – еліптичність;  $-\Delta\nu$  – зсув частоти валентного коливання  $\nu(AN)$  у разі втягування групи АН у Н-зв'язок АН...В;  $E_{HB}$  – енергія Н-зв'язку, розрахована за формулою Йогансена [31] або Еспінози–Молінса–Лекомте [32].

оберненої гугстинівської АТ гН [6] (рис. та табл. 1).

Усі досліджені конфігурації пари основ АТ стабілізуються двома канонічними (NH...O/N) та одним неканонічним (CH...O) Н-зв'язком. Їхні геометричні, електронно-топологічні, коливальні та енергетичні характеристики наведено у табл. 1.

Досліджені конфігурації пари основ ДНК АТ утворюють ряд енергетичної вигідності: АТ Н > АТ гН > АТ WC > АТ гWC і мають таку заселеність: АТ Н : АТ гН : АТ WC : АТ гWC = 48,9% : 31,9% : 10,7% : 8,5%. Цей ряд стабільності не корелює із сумарною енергією міжмолекулярних водневих зв'язків (табл. 2): спостережуваний ефект пов'язаний, швидше за все, із дипольно-дипольною взаємодією основ. Це означає, що класичний мас-спектрометричний експеримент із визначення ентальпії взаємодії основ А і Т, метильованих за глікозидними атомами азоту [34], треба пояснювати співіснуванням чотирьох конфігурацій пари АТ (рис. та табл. 1, 2), а не лише вотсон-криківською парою АТ, як це робилося раніше.

Для всіх Н-зв'язків спостерігається додатне значення лапласіана електронної густини  $\Delta\rho$  в критичній точці Н-зв'язку АН...В, при цьому його значення розміщуються в межах 0,014÷0,099 ат. од. В той же час значення електронної густини  $\rho$ , яка зазвичай розглядається як міра міцності Н-зв'язування [29], лежить у діапазоні 0,004÷0,041 ат. од. Отже, найслабшим з-поміж усіх зафіксованих є Н-зв'язок С2Н...О2 (0,74 ккал/моль), водночас найсильніший – Н-зв'язок N3Н...N1 (7,62 ккал/моль) у парі основ АТ WC (табл. 1). Цікаво, що найменше значення еліптичності  $0,33 \cdot 10^{-2}$  спостерігається для Н-зв'язку С2Н...О4 в парі АТ гWC. Ці результати узгоджуються з відомими даними літератури [16, 18].

Усі ідентифіковані Н-зв'язки задовольняють геометричним критеріям Н-зв'язування: відстані  $d_{H...B}$  менші, ніж сума ван-дер-ваальсових радіусів Бонді [35] (для атомів водню Н (1,20 Å), кисню О (1,52 Å) і азоту N (1,55 Å)) та лежать в межах 1,812 Å (Н-зв'язок N3Н...N7 у гугстинівській парі основ АТ Н)÷2,890 Å (Н-зв'язок С2Н...О2 в оберненій вотсон-криківській парі основ АТ WC). Кути

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

Пари основ	$\Delta E$	$\Delta G$	$-\Delta G_{\text{int}}$	$-\Delta E_{\text{int}}$	$\sum E_{\text{HB}}$	$-\frac{\sum E_{\text{HB}}}{E_{\text{int}}}, \%$
АТ Н	0,00	0,00	0,89	14,52	12,40	85,4
АТ гН	0,22	0,26	0,72	14,40	12,10	84,0
АТ WC	1,08	0,95	1,43	14,92	13,04	87,3
АТ гWC	1,32	1,09	0,08	13,32	12,70	95,3

Позначення:  $\Delta E$  – відносна електронна енергія;  $\Delta G$  – відносна енергія Гіббса;  $-\Delta G_{\text{int}}$  – 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. табл. 1).

Н-зв'язування розміщуються в діапазоні 121,7° (Н-зв'язок С8Н...О2 у парі основ АТ Н) ÷ 178,8° (Н-зв'язок N3Н...N1 в парі основ АТ WC) (табл. 1).

Подовження донорної групи АН за утворення Н-зв'язку АН...В  $\Delta d_{\text{АН}}$  додатне в усіх випадках та лежить у межах 0,0002 ÷ 0,032 Å (табл. 1). При цьому його мінімальне значення спостерігається для Н-зв'язку С2Н...О2 в парі АТ WC (0,0002 Å), а максимальне – для Н-зв'язку N3Н...N1 у парах АТ WC та АТ гWC (0,032 Å).

Спектроскопічні характеристики Н-зв'язків добре узгоджуються з геометричними даними. Зсув частоти валентного коливання  $\nu(\text{АН})$  донорної групи АН додатний за Н-зв'язування (зсув у червону область спектра) для всіх канонічних Н-зв'язків; для неканонічних Н-зв'язків С2Н...О2/О4 та С8Н...О2/О4 зафіксовано «блакитний зсув» валентного коливання  $\nu(\text{СН})$  (табл. 1). Незважаючи на «блакитний зсув» коливальної моди  $\nu(\text{С2Н}/\text{С8Н})$  у разі утворення Н-зв'язків С2Н...О2/О4 та С8Н...О2/О4, зростання частоти (на 19,3/20,5 см<sup>-1</sup> для Н-зв'язків С2Н...О2/О4 і на 21,8/24,9 см<sup>-1</sup> для Н-зв'язків С8Н...О2/О4) та

інтенсивності (в 0,1/5,5 раза для Н-зв'язків С2Н...О2/О4 і в 1,8/1,7 раза для Н-зв'язків С8Н...О2/О4) неплосинного коливання групи СН  $\gamma(\text{СН})$  за їх утворення свідчить про те, що вони є справжніми Н-зв'язками.

Слід зазначити, що всі досліджені пари основ ДНК є термодинамічно стійкими структурами:  $\Delta G_{\text{int}} < 0$ . При цьому найбільшу енергію зв'язування має канонічна вотсон-криківська пара АТ WC (14,92 ккал/моль), а найменшу – обернена вотсон-криківська пара АТ гWC (13,32 ккал/моль) (табл. 2).

У всіх досліджених нами структурах внесок сумарної енергії Н-зв'язків в електронну енергію їхньої стабілізації лежить у межах 84,0 ÷ 95,3% (табл. 2). Це означає, що не лише Н-зв'язування, а й інші типи міжмолекулярних взаємодій [36] вносять істотний вклад в енергію стабілізації досліджених пар основ ДНК.

Таким чином, одержані нами дані свідчать про те, що аналогічні конфігурації пар основ ДНК АТ і G·C мають ізоелектронну будову. Аналіз вибраних геометричних характеристик тих самих конфігурацій пар АТ і G·C (табл. 3) свідчить про те, що вони є ізоморфними. Більше того, ретельне порівняння міжмолекулярних

Таблиця 3. Вибрані геометричні параметри досліджених пар основ ДНК. Розрахунок на рівні теорії B3LYP/6-311++G(d,p) у вільному стані

Геометричні параметри	АТ				G·C			
	АТ WC	АТ гWC	АТ Н	АТ гН	G·C WC	G*·C* гWC	G*·C* Н	G*·C* гН
R(Н-Н)	10,132	10,423	7,872	8,869	10,213	10,318	8,035	8,783
N1НН	54,7	46,8	61,9	34,9	55,1	52,3	59,6	39,9
N9НН	54,2	31,2	50,7	23,0	53,1	27,9	48,3	19,7

Позначення: R(Н-Н) – відстань між глікозидними атомами водню Н, Å; N1НН та N9НН – глікозидні кути, град.

Таблиця 4. Частоти міжмолекулярних коливальних мод (у  $\text{см}^{-1}$ ) досліджених пар основ ДНК. Розрахунок на рівні теорії  $V3LYP/6-311++G(d,p)$  у вільному стані

A-T				G-C			
A-T WC	A-T rWC	A-T H	A-T rH	G-C WC	G*·C* rWC	G*·C* H	G*·C* rH
20,9	20,7	22,6	23,0	18,7	20,3	24,9	23,1
30,6	33,4	31,1	35,6	31,8	33,0	32,2	33,8
56,9	51,9	60,7	57,9	60,3	68,9	72,6	67,9
63,8	60,1	68,4	65,5	93,5	109,5	73,0	68,9
101,9	97,9	98,9	95,6	125,2	120,0	113,4	104,8
105,4	112,4	104,8	111,8	129,4	126,1	134,3	123,0

коливальних мод для відповідних конфігурацій пар А-Т і G-C (табл. 4) вказує на те, що вони мають близькі динамічні характеристики.

На наше глибоке переконання, таку поведінку досліджених пар основ ДНК не можна розцінювати як випадковий збіг обставин, а радше розглядати як результат копінгового еволюційного процесу [37]. Одержані нами результати дозволяють постулювати інший, неіонізаційний механізм перетворення вотсон-криківської пари G-C в гугстинівську пару G\*·C\* Н у складі ДНК. Це зовсім не означає, що запропонований нами механізм «дихання» пар G-C ДНК за Гугстином є цілком і повністю альтернативним механізмом, описаному в роботі [7]: швидше за все він доповнює його в тих випадках, коли ДНК перебуває не в стані водного розчину [7], а функціонує в клітині разом із протеїнами і протонування цитозину за положенням N3 унеможливлене із фізико-хімічних міркувань (див. бібліографію в роботах [17–19]). На перший погляд здається, що такий сценарій розвитку подій є малоімовірним, оскільки відносна енергія Гіббса пари G\*·C\* Н складає чималу величину – 9,63 ккал/моль за нормальних умов. Але якщо врахувати, що ця енергія еквівалентна енергії двох Н-зв'язків середньої міцності, то вищезгаданий сценарій може бути реалізований відповідними протеїнами, що специфічно взаємодіють із парою G\*·C\* Н у складі ДНК.

Отже, методами неемпіричної квантової хімії на рівні теорії  $MP2/6-311++G(2df,pd)//V3LYP/6-311++G(d,p)$  вперше показано, що гугстинівська, обернена гугстинівська, вотсон-криківська і обернена вотсон-

криківська конфігурації пар основ А-Т і G-C є ізоелектронними та ізоморфними структурами з близькими динамічними властивостями. Спираючись на ці результати постульовано неіонізаційний механізм «дихання» G-C пар ДНК за Гугстином, а саме – перетворення таутомеризованої (льовдінівської) пари G\*·C\*, яка має вотсон-криківську геометрію, у гугстинівську електронейтральну пару G\*·C\* Н, яка стабілізується трьома Н-зв'язками  $O6H...N4$ ,  $N3H...N7$  і  $C8H...O2$ . Припускається, що такий сценарій розвитку подій спрацьовує в тому разі, коли ДНК знаходиться не у водному розчині, а функціонує разом із протеїнами і протонування цитозину по атому N3 унеможливлене.

*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 у складі Українського національного Гріду за люб'язно надані обчислювальні ресурси 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).*

## СТРУКТУРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЧЕТЫРЕХ КОНФИГУРАЦИЙ ПАР ОСНОВАНИЙ ДНК А·Т И G·C

*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

Методами неэмпирической квантовой химии на уровне теории MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) впервые показано, что хугстиновская, обратная хугстиновская, уотсон-криковская и обратная уотсон-криковская конфигурации пар оснований ДНК А·Т и G·C являются изоэлектронными и изоморфными структурами с близкими динамическими свойствами. Основываясь на этих результатах, постулирован неионизационный механизм «дыхания» G·C пар оснований ДНК по Хугстину, а именно – превращение таутомеризированной (лөвдиновской) пары G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup>, которая имеет уотсон-криковскую геометрию, в хугстиновскую электронейтральную пару G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> Н, которая стабилизируется тремя Н-связями O6H...N4, N3H...N7 и C8H...O2. Предполагается, что такой сценарий развития событий срабатывает в том случае, когда ДНК находится не в водном растворе, а функционирует вместе с протеинами, и протонирование атома N3 цитозина невозможно.

**Ключевые слова:** уотсон-криковская, обратная уотсон-криковская, хугстиновская и обратная хугстиновская пары оснований ДНК А·Т; «дыхание» пары оснований ДНК G·C по Хугстину; межмолекулярные водородные связи; квантово-химические расчеты; анализ топологии электронной плотности.

## STRUCTURAL AND ENERGETIC PROPERTIES OF THE FOUR CONFIGURATIONS OF THE A·T AND G·C DNA BASE PAIRS

*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

Using the methods of non-empirical quantum chemistry 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 Hoogsteen, reverse Hoogsteen, Watson-Crick and reverse Watson-Crick configurations of the A·T and G·C DNA base pairs are isoelectronic and isomorphic structures with similar dynamic properties. Based on these results, non-ionisation mechanism of the Hoogsteen «breathing» of the G·C DNA base pair, namely transformation of the tautomerised (Löwdin's) G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> base pair with Watson-Crick geometry into the Hoogsteen electroneutral G<sup>\*</sup>·C<sup>\*</sup> H base pair stabilized by the three O6H...N4, N3H...N7 and C8H...O2 H-bonds, was postulated. It is suggested that such scenario activates only in those cases, when DNA is not located in aqueous solution, but works together with proteins and cytosine protonation at the N3 atom is precluded.

**Key words:** Watson-Crick, reverse Watson-Crick, Hoogsteen and reverse Hoogsteen A·T DNA base pairs; Hoogsteen “breathing” of the G·C DNA base pair; intermolecular hydrogen bonds; quantum-chemical calculations; topological analysis of the electron density.

1. Löwdin P.-O. // Rev. Modern Phys. – 1963. – 35, N 3 – P. 724–732.
2. Löwdin P.-O. // Adv. Quant. Chem. – 1966. – 2. – P. 213–360.

3. Watson J. D., Crick F. H. C. // Nature. – 1953. – **171**, N 4361. – P. 964–967.
4. Tchurikov N. A., Chistyakova L. G., Zavilgelsky G. B. et al. // J. Biol. Chem. – 2000. – **275**, N 34. – P. 26523–26529.
5. Hoogsteen K. // Acta Crystallogr. – 1963. – **16**. – P. 907–916.
6. Zagryadskaya E. I., Doyon F. R., Steinberg S. V. // Nucleic Acids Res. – 2003. – **31**, N 14. – P. 3946–3953.
7. Nikolova E. N., Kim E., Wise A. A. et al. // Nature. – 2011. – **470**, N 7335. – P. 498–502.
8. Frank-Kamenetskii M. D. // Artificial DNA: PNA & XNA. – 2011. – **2**, N 1. – P. 1–3.
9. Samijlenko S. P., Krechkivska O. M., Kosach D. A., Hovorun D. M. // J. Mol. Struct. – 2004. – **708**, N 1–3. – P. 97–104.
10. Platonov M. O., Samijlenko S. P., Sudakov O. O. et al. // Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc. – 2005. – **62**, N 1–3. – P. 112–114.
11. Brovarets' O. O., Yurenko Y. P., Dubey I. Ya., Hovorun D. M. // J. Biomol. Struct. Dyn. – 2012. – **29**, N 6. – P. 1101–1109.
12. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // Biopolym. Cell. – 2010. – **26**, N 1. – P. 72–76.
13. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // Biopolym. Cell. – 2010. – **26**, N 4. – P. 295–298.
14. Brovarets' O. O., Zhurakivsky R. O., Hovorun D. M. // Biopolym. Cell. – 2010. – **26**, N 5. – P. 398–405.
15. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // Opt. Spectrosc. – 2011. – **111**, N 5. – P. 750–757.
16. Brovarets' O. O., Kolomiets' I. M., Hovorun D. M. Elementary molecular mechanisms of the spontaneous point mutations in DNA: A novel quantum-chemical insight into the classical understanding / In Tomofumi Tada (Ed.), Quantum chemistry – molecules for innovations. – Rijeka: In Tech Open Access, 2012. – P. 59–102.
17. Brovarets' O. O., & Hovorun D. M. // J. Biomol. Struct. Dyn. – 2012. – DOI: 10.1080/07391102.2012.755795.
18. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // J. Biomol. Struct. Dyn. – 2012. – DOI:10.1080/07391102.2012.715041.
19. Brovarets' O. O., Hovorun D. M. // J. Mol. Model. – 2012. – DOI: 10.1007/s00894-012-1720-9.
20. Kondratyuk I. V., Samijlenko S. P., Kolomiets' I. M., Hovorun D. M. // J. Mol. Struct. – 2000. – **523**, N 1–3. – P. 109–118.
21. Danilov V. I., van Mourik T., Kurita N. et al. // J. Phys. Chem. A. – 2009. – **113**, N 11. – P. 2233–2235.
22. Wang W., Hellinga H. W., Beese L. S. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2011. – **108**, N 43. – P. 17644–17648.
23. Danilov V. I., Anisimov V. M., Kurita N., Hovorun D. // Chem. Phys. Lett. – 2005. – **412**, N 6. – P. 285–293.
24. Yurenko Y. P., Zhurakivsky R. O., Samijlenko S. P., Hovorun D. M. // J. Biomol. Struct. Dyn. – 2011. – **29**, N 1. – P. 51–65.
25. Pelmeshnikov A., Hovorun D. M., Shishkin O. V., Leszczynski J. // J. Chem. Phys. – 2000. – **113**, N 14. – P. 5986–5990.
26. Shishkin O. V., Pelmeshnikov A., Hovorun D. M., Leszczynski J. // Chem. Phys. – 2000. – **260**, N 3. – P. 317–325.
27. Boys S. F., Bernardi F. // Mol. Phys. – 1970. – **19**, N 4. – P. 553–566.
28. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 09 (Revision B.01). – Wallingford CT: Gaussian Int., 2010.
29. Bader R. W. F. Atoms in molecules. A quantum theory. – Oxford: Clarendon Press, 1990. – 436 p.
30. Keith T. A. AIMAll (Version 11.12.19). – 2011. – Retrieved from <http://aim.tkgristmill.com>.
31. Iogansen A. V. // Spectrochim. Acta. Part A. – 1999. – **55**, N 7–8. – P. 1585–1612.
32. Espinosa E., Molins E., Lecomte C. // Chem. Phys. Lett. – 1998. – **285**, N 3–4. – P. 170–173.
33. Saenger W. Principles of nucleic acid structure. – New York: Springer, 1984. – 556 p.
34. Sukhodub L. F., Yanson I. K. // Nature. – 1976. – **264**, N 5583. – P. 245–247.
35. Bondi A. J. // J. Phys. Chem. – 1964. – **68**, N 3. – P. 441–451.
36. Kaplan I. Intermolecular interactions: Physical picture, computational methods and model potentials. – 2006. – Chichester: John Wiley & Sons Ltd. – 367 p.
37. Wächtershäuser G. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1988. – **85**, N 4. – P. 1134–1135.

Отримано 12.03.2013