



УДК 577.3

© 2010

І. С. Войтешенко, Р. О. Жураківський,  
академік НАН України Л. А. Булавін,  
член-кореспондент НАН України Д. М. Говорун

## Конформаційний аналіз низькомолекулярної моделі аніонного цукрово-фосфатного ланцюга ДНК

*Вперше квантово-механічним методом на рівні теорії  $MP2/6-311++G(2df,pd)//DFT$   $B3LYP/6-31++G(d,p)$  проведено вичерпний конформаційний аналіз низькомолекулярної сполуки, що моделює аніонний цукрово-фосфатний кістяк ДНК. Встановлено, що з усіх можливих конформерів лише 12 є твірними цукрово-фосфатного кістяка А-подібних форм ДНК. Не зафіксовано твірних конформерів цукрово-фосфатного кістяка В-подібних форм ДНК. Виявлено 231 твірний конформер цукрово-фосфатного кістяка Р-подібних форм ДНК, що мають широкий спектр конформацій цукрів, найчисленнішими серед яких є  $C1'$ -exo та  $C3'$ -endo.*

Роботу присвячено теоретичному дослідженню фізичних причин спіральності ДНК за допомогою сучасних квантово-механічних методів з використанням модельного біцукрово-фосфатного залишку в аніонній формі. Така постановка задачі, на нашу думку, важлива щонайменше з декількох причин. Насамперед, вказана сполука є найпростішою структурною моделлю аніонного полімерного ланцюга ДНК — надзвичайно важливого об'єкта досліджень молекулярної біофізики, біохімії та структурної біології. Як відомо, конформаційні властивості ДНК, що лежать в основі її біологічної активності, значною мірою визначаються конформаційними можливостями цукрово-фосфатного кістяка. Вичерпні фізичні уявлення про основні закономірності просторової будови останнього дозволять краще зрозуміти “внутрішню логіку” структури ДНК, зокрема походження її спіральності. Основна складність при цьому полягає в тому, що апіорі стверджувати, яка саме конформація відповідає за ті чи інші біологічні функції, практично неможливо, бо критерій енергетичної вигідності тут зазвичай не спрацьовує.

Всебічно аналізуючи конформаційні можливості модельного депротонованого біцукрового залишку, ми продовжуємо започаткований раніше підхід до теоретичного конформаційного аналізу модельних фрагментів ДНК [1–5] та намагаємося відповісти на важливе запитання — які саме фізичні причини відповідають за спіральну структуру цієї біологічно важливої макромолекули.

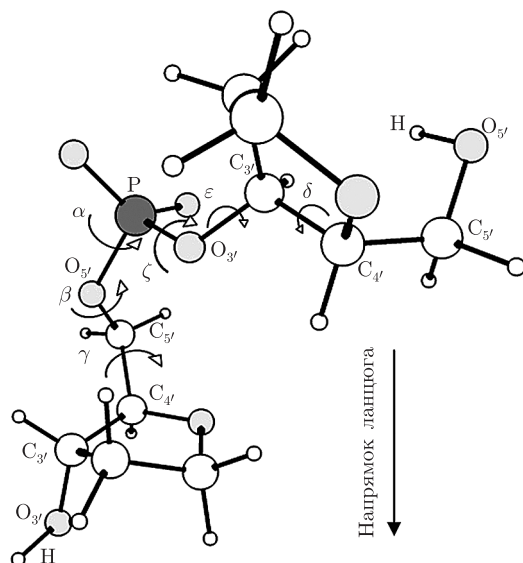


Рис. 1. Просторова будова сполуки, що моделює аніонний цукрово-фосфатний кістяк ДНК: позначення конформаційних змінних і атомів загальноприйняте [8]

**Об’єкт та методи дослідження.** Досліджувана низькомолекулярна модель аніонно-цукрово-фосфатного ланцюга ДНК — аніонний біцукровий залишок — зображена на рис. 1. Стартові її конформери отримано з повного конформаційного сімейства 1',2'-дидезоксирибози, що були знайдені раніше перебором усіх можливих конформацій [1]. Крім того, додатково враховано, що джерелом конформаційної мінливості біцукрового залишку є загальмоване повертання навколо кожного з одинарних хімічних зв’язків цукрово-фосфатного кістяка на  $120^\circ$ , що відповідає розташуванню відповідних номенклатурних торсійних кутів у сусідній сектор їхніх стійких значень. Для автоматичної генерації усіх можливих стартових конформерів та їхнього подальшого детального перебору нами створено програму, яка дозволяє змінювати торсійні кути з кроком  $120^\circ$  і поєднувати кожен з отриманих раніше конформерів дезоксирибози з усіма можливими конформерами. Сімейство конформацій вважалось вичерпним, якщо будь-яка наступна стартова конформація, сформована на основі будь-якої із сімейства раніше отриманих, “скочувалася” в процесі оптимізації в один з конформерів цього сімейства. Наведена процедура є доволі тривалою, бо вимагає перебору десятків тисяч стартових конформацій. Разом з тим на відміну від більш формалізованих підходів, таких, наприклад, як сканування гіперповерхні потенціальної енергії, вона дозволяє краще “відчутти” конформаційну механіку досліджуваної молекули.

Розрахунки без будь-яких структурних обмежень проводили на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd) // DFT B3LYP/6-31++G(d p). Коливальні спектри розраховували в гармонійному наближенні, застосовуючи масштабний множник для частот 0,9608. Ці дані використовували для ідентифікації стійкості отриманих структур (за умови відсутності в їхніх коливальних спектрах уявних частот) та для обчислення їхньої відносної енергії Гіббса за стандартних умов.

Квантово-механічні розрахунки виконували з використанням програмного пакета “GAUSSIAN03” для платформи Win32 [6].

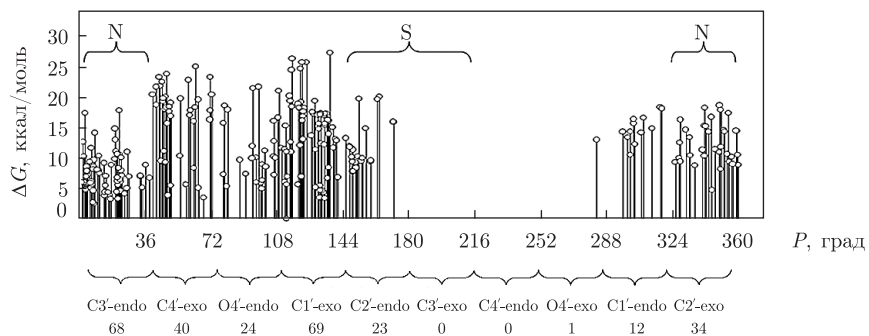


Рис. 2. Кількісний розподіл біцукрових залишків, які моделюють гомогенний цукрово-фосфатний ланцюг ДНК, за класичними конформаційними підсімействами: N, S — конформери з північними та південними цукрами відповідно

Набір параметрів спіралі макромолекули визначали, використовуючи так звані внутрішні параметри: довжини зв'язків, валентні та двогранні кути, за допомогою методу, запропонованого в роботі [7].

Використано стандартні позначення атомів та класичних конформаційних змінних цукрово-фосфатного кістяка ДНК [8].

**Результати та їхнє обговорення.** Проведені розрахунки дозволили встановити, що модельний біцукровий залишок аніонного цукрово-фосфатного кістяка ДНК має 3217 стійких конформерів. Виявилося, що з усієї цієї множини лише 438 мають цукри в однакових конформаціях і можуть бути потенційно використані для побудови гомогенного (однорідного) цукрово-фосфатного кістяка ДНК. Подальший аналіз показав, що лише 271 з них, які розміщуються в діапазоні відносних вільних енергій Гіббса 0–27,14 ккал/моль, за стандартних умов мають прийнятний набір двогранних кутів  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\varepsilon$  та  $\zeta$ , які дозволяють без стеричних перешкод і ускладнень побудувати однорідні спіралі. Решта 167 конформерів є замкненими структурами і мають внутрішньомолекулярні водневі зв'язки, що унеможливає реалізацію згаданих спіралей.

Встановлено, що модельні біцукрові залишки, які моделюють гомогенний цукрово-фосфатний ланцюг ДНК, утворюють два сімейства, розподіл яких за конформаційними властивостями наведено на рис. 2. Усі сформовані на їхній основі аніонні цукрово-фосфатні спіральні структури є правосторонніми.

У першому сімействі нараховується 40 структур з прийнятними наборами конформаційних параметрів, що дозволяють утворювати гомогенні спіральні кістяки ДНК у тому розумінні, що при приєднанні до них основ з відповідними значеннями кута  $\chi$  утворюються спіралі, у яких основи орієнтовані в напрямку до її осі. Модельні конформери цього сімейства мають цукри в конформаціях (у дужках вказана кількість): C2'-exo (N) (22), C3'-endo (N) (12), C1'-endo (2), C4'-exo (2), O4'-exo (1), C1'-exo (1). Оскільки конформаційні переходи в межах одного із підсімейств N або S відбуваються практично без подолання енергетичних бар'єрів [8], то усі 34 N-структури є твірними цукрово-фосфатного кістяка A-подібних форм ДНК. Конформерів з S-цукрами, що є твірними цукрово-фосфатного кістяка B-подібних форм ДНК, не виявлено.

Енергетично найвигіднішому твірному конформеру з першого сімейства відповідає спіралеподібний цукрово-фосфатний кістяк A-подібної форми ДНК з кутом спірального обертання  $72,2^\circ$  (рис. 3, a), що більше, ніж у два рази перевищує аналогічну величину в нативній

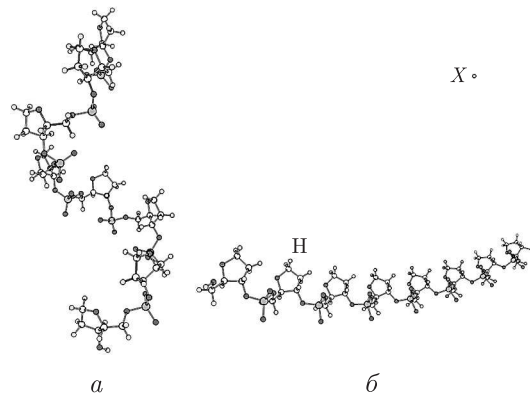


Рис. 3. Аніонний цукрово-фосфатний ланцюг *A*-подібної форми ДНК, твірною якого є енергетично найвигідніший конформер модельного біцукрово-фосфатного залишку (*a*) та аналогічний ланцюг з найменшим кутом спірального обернення (*б*) (*H* — місце приєднання основ, *X* — вісь спіралі)

макромолекулі [8]. Даний факт вказує на те, що вищезгадана однорідна спіраль є перекрученою і містить запас енергії, за рахунок якої, зокрема, реалізується стійкість подвійної спіралі ДНК. На нашу думку, з цього випливає, що нетрадиційною складовою стекінгових взаємодій ДНК є притискання сусідніх пар основ одна до одної за рахунок вищезгаданої напруги в цукрово-фосфатному кістяку [9]. Інші 11 твірних конформерів *A*-подібної форми ДНК з *SZ'*-endo цукрами дають спіральні цукрово-фосфатні кістяки, значення кутів спірального обернення яких лежать у межах  $9,2-176,0^\circ$ . При цьому двогранні кути, що відповідають перекрученню спіралям, істотно відрізняються (табл. 1). Так, в енергетично найвигіднішому конформері з шести торсійних кутів нативним секторам значень, що реалізуються в ДНК, відповідають п'ять кутів:  $\gamma \in sk$ ,  $\beta \in an$ ,  $\alpha \in -sk$ ,  $\varepsilon \in -ak$  і  $\delta \in sk$ , а кут  $\zeta$  значно відрізняється і належить сектору *sk*. Можемо зробити висновок, що за реалізацію перекрученого стану ланцюга, побудованого з енергетично найвигіднішого конформера, відповідає номенклатурний торсійний кут —  $\zeta$ .

У спіралі з кутом спірального обернення  $45,6^\circ$ , що відповідає найвисокоенергетичнішому твірному конформеру, природним значенням торсійних кутів нативної ДНК [8] відповідають лише три кути:  $\gamma \in sk$ ,  $\beta \in an$  і  $\delta \in sk$ ; інші кути —  $\alpha \in an$ ,  $\zeta$  і  $\varepsilon \in sk$ .

Усі твірні конформери з першого сімейства за стандартних умов знаходяться в діапазоні відносних енергій Гіббса  $0-8,59$  ккал/моль.

У другому сімействі конформерів — твірних гомогенних спіралей — основи в яких зорієнтовані назовні від осі спіралі, налічується 231 конформер. Всі вони є твірними спіралеподібних цукрово-фосфатних ланцюгів *P*-подібних форм ДНК, просторова будова яких була запропонована 1953 р. Полінгом [10]. Серед них 23 мають цукри з конформацією *SZ'*-endo (*S*), характерною для *B*-форми ДНК. Основні параметри конформерів з *S*-цукрами наведено в табл. 2. Експериментально *P*-подібні конформації ДНК виявлено при структурних переходах одноланцюгової, витягнутої та суперскрученої ДНК [11]. Крім того, ця незвична конформація ДНК зареєстрована *in vivo* за допомогою УФ та флуоресцентної спектроскопії при взаємодії ДНК з білками у вірусах Pf1, Xf та fd [12]. Найбільш детально вона описана для вірусу Pf1 [13]. Експериментальні дані вказують на те, що така структура ДНК має кут спірального обернення більший, ніж  $140^\circ$ , що перевищує звичні  $36$  або  $32^\circ$  [11]. Більше того, *P*-подібні конформації ДНК можуть бути утворені внаслідок неперервного переходу з *B*- або *A*-форм ДНК [11].

Таблиця 1. Основні структурні параметри конформерів твірних цукрово-фосфатного кістяка А-подібних форм ДНК та однорідних спіралей, що їм відповідають

Конформація цукру	Кут спірального обертання	$\gamma$	$\beta$	$\alpha$	$\zeta$	$\epsilon$	$\delta$	$P$	$\nu_{\max}$	$\Delta G$
C3'-endo	72,2	65,3	179,9	-77,5	-76,0	-106,4	80,4	15,3	38,4	0,00
C3'-endo	87,7	-56,0	164,3	75,9	-111,3	-92,3	81,6	13,7	38,2	0,08
C3'-endo	71,5	79,5	-118,9	162,8	171,4	-109,0	89,5	7,1	36,1	0,30
C3'-endo	107,8	34,2	-108,0	-171,3	-88,3	-162,9	76,0	25,4	39,8	0,69
C3'-endo	168,4	34,8	-108,5	178,9	81,5	-162,0	88,6	2,2	35,8	1,64
C3'-endo	95,6	38,1	-109,0	165,0	81,7	86,0	72,1	26,6	39,4	2,59
C3'-endo	155,8	74,4	-120,8	171,7	80,1	-161,4	87,8	3,7	36,0	3,49
C3'-endo	9,3	63,6	-179,3	-78,6	-87,6	-168,0	75,5	21,0	39,9	3,96
C3'-endo	143,3	74,6	-121,1	169,7	78,6	-144,9	84,4	5,1	35,8	4,98
C3'-endo	176,1	55,1	85,2	-122,5	140,9	-172,5	81,6	19,6	38,3	6,69
C3'-endo	144,9	75,6	92,6	170,8	79,8	-123,6	89,8	1,4	36,5	8,25
C3'-endo	45,6	63,1	-179,8	171,3	87,3	72,3	77,5	19,2	37,7	8,59

Примітка. Тут і в табл. 2  $\Delta G$  — вільна енергія Гіббса за нормальних умов, ккал/моль; позначення кутів (град.) — стандартні [8].

Таблиця. 2. Основні структурні параметри конформерів твірних спіральних цукрово-фосфатних ланцюгів *P*-подібних форм ДНК та спіралей, що їм відповідають

Конформація цукру	Кут спірального обертання	$\gamma$	$\beta$	$\alpha$	$\zeta$	$\epsilon$	$\delta$	$P$	$\nu_{\max}$	$\Delta G$
C2'-endo	75,5	48,6	-113,0	-81,9	-83,6	-158,7	138,8	148,8	37,1	0,00
C2'-endo	79,2	52,1	-111,4	-84,9	-83,4	-159,7	138,9	148,9	37,2	0,04
C2'-endo	76,4	47,5	-114,3	-74,3	169,1	-166,2	140,2	150,7	37,0	0,59
C2'-endo	118,0	51,7	-113,8	139,6	149,4	-167,4	139,9	150,5	37,0	1,48
C2'-endo	110,3	51,2	-112,5	-78,1	-173,3	-87,5	141,7	148,7	37,3	1,62
C2'-endo	112,9	50,9	-176,1	-132,5	70,6	-103,8	148,8	158,5	38,0	1,64
C2'-endo	175,4	47,1	-134,5	84,0	167,9	-166,7	140,9	153,5	36,5	1,73
C2'-endo	111,9	50,4	-174,3	-133,6	69,6	-103,8	148,9	158,7	38,0	1,80
C2'-endo	146,6	46,6	-116,2	-171,2	67,3	-164,9	140,4	151,1	37,4	1,98
C2'-endo	158,8	44,3	168,6	76,9	86,4	-111,6	144,5	154,1	37,4	2,19
C2'-endo	143,2	46,0	-139,3	74,8	-171,1	-86,1	141,3	148,3	37,5	2,35
C2'-endo	134,0	44,8	172,6	77,4	74,3	-163,7	140,9	151,5	37,6	2,48
C2'-endo	145,8	38,5	107,5	132,0	84,4	-95,2	141,9	149,0	37,3	3,55
C2'-endo	118,5	37,6	105,6	134,7	157,5	-165,6	138,7	148,2	37,2	3,84
C2'-endo	155,2	37,3	101,7	147,3	-77,7	-150,6	138,7	147,3	37,4	3,98
C2'-endo	153,8	38,7	102,2	146,9	-77,9	-150,6	138,6	147,0	37,4	4,15
C2'-endo	136,8	171,8	87,0	-155,7	67,7	-130,4	138,5	145,1	38,6	5,45
C2'-endo	146,1	50,5	-102,5	-133,1	65,0	-168,1	144,7	155,9	38,0	7,04
C2'-endo	172,8	47,3	-113,4	-76,6	-62,4	-82,7	159,1	171,1	38,4	8,09
C2'-endo	176,8	51,0	-112,6	-78,3	-62,1	-83,3	159,2	171,0	38,4	8,13
C2'-endo	52,2	51,9	-106,3	-143,0	73,3	0,0	147,7	162,4	36,7	11,81
C2'-endo	168,6	41,1	-175,7	163,5	-73,7	81,1	129,8	152,2	31,4	11,86
C2'-endo	54,0	51,1	-105,5	-138,0	73,2	-1,1	148,5	163,4	36,9	12,21

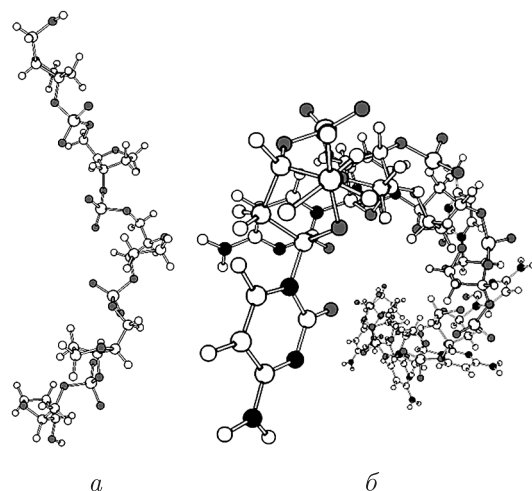


Рис. 4. Спіраль цукрово-фосфатного ланцюга *P*-подібної форми ДНК, твірною якої є енергетично найвигідніший конформер з другого сімейства (*a*), та аналогічна спіраль з приєднаними цитозинами, твірною якої є енергетично найбільш невідповідний конформер (*b*)

208 конформерів з другого сімейства мають відмінні від *B*-форми ДНК цукри: у 68 виявлено конформації цукру *C1'*-exo, в 24 — *O4'*-endo та в 38 — *C4'*-exo (вони є перехідними конформерами між цукрами з *S*- до *N*-сімейств або навпаки [8]). 56 модельних сполук мають цукри з конформацією *C3'*-endo (*N*) та 12 з *C2'*-exo (*N*), що характерно для *A*-форми ДНК, а також 10 конформерів з цукром *C1'*-endo, що є близькими до *N* сімейства. Значення кутів спірального обертання, що відповідають цим твірним конформерам, лежать у діапазоні  $25,3$ – $179,7^\circ$ . Конформацій з енергетично невідповідним шляхом переходу від *S* до *N* через цукри *C4'*-endo нами не виявлено.

Енергетично найвигіднішому твірному конформеру з другого сімейства, який продукує цукрово-фосфатний кістяк *P*-подібної форми ДНК з цукром *C2'*-endo, відповідає кут спірального обертання  $75,5^\circ$  (рис. 4, *a*), що майже вдвічі перевищує аналогічну величину для нативної макромолекули ДНК. При цьому торсійні кути, які визначають основні параметри спіралі:  $\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\varepsilon$  і  $\zeta$  — лежать у межах природних значень, що спостерігаються в полінуклеотидах [8]. Разом з цим, кут  $\beta$  знаходиться в області  $-ak$  і його величина майже на  $75^\circ$  перевищує аналогічне значення для нативної макромолекули [8].

Спіраль, яка відповідає *P*-формі ДНК і побудована на основі енергетично найбільш невідповідного конформера модельного цукрово-фосфатного залишку з *C2'*-endo цукром, має кут спірального обертання  $54,0^\circ$  та торсійні кути  $\gamma$  і  $\delta$ , значення яких подібні до величин відповідних кутів у полінуклеотидах, а також кути  $\alpha, \beta \in -ak$ ,  $\varepsilon \in -cn$  та  $\zeta \in ck$ , які реалізують її перекручений стан (див. рис. 4, *b*).

Таким чином, на рівні теорії  $MP2/6-311++G(2df,pd)//DFT\ B3LYP/6-31++G(d,p)$  проведено вичерпний конформаційний аналіз низькомолекулярної сполуки, що моделює аніонний цукрово-фосфатний кістяк ДНК, а саме біцукрово-фосфатного залишку в аніонній формі. Встановлено, що з усіх 3217 його можливих конформерів лише 12 є твірними аніонного цукрово-фосфатного ланцюга *A*-подібних форм ДНК з кутами спірального обертання, що лежать в діапазоні  $9,2$ – $176,0^\circ$ . Показано, що не існує твірної конформації для однорідного спірального цукрово-фосфатного кістяка *B*-подібних форм ДНК. Виявлено 231 конформер, які є твірними спіральних цукрово-фосфатних ланцюгів, характерних для *P*-по-

дібних форм ДНК. Вони мають широкий конформаційний спектр цукрів, найчисленнішими з-поміж яких є C1'-exo- і C3'-endo-сімейства. Отримані результати, на нашу думку, істотно розширюють існуючі уявлення про просторову будову та конформаційну мінливість ДНК.

1. Жураківський Р. О., Юренко Є. П., Говорун Д. М. Конформаційні властивості 1',2'-дезоксирибози – модельного цукрового залишку 2'-дезоксирибонуклеозидів: результати неемпіричного квантово-механічного дослідження // Доп. НАН України. – 2006. – № 8. – Р. 207–213.
2. Svozil D., Sponer J. E., Marchan I. et al. Geometrical and Electronic Structure Variability of the Sugar-phosphate Backbone in Nucleic Acids // J. Phys. Chem. – 2008. – **112**. – P. 8188–8197.
3. MacKerell A. D. Jr. Contribution of the Intrinsic Mechanical Energy of the Phosphodiester Linkage to the Relative Stability of the A, B<sub>I</sub>, and B<sub>II</sub> Forms of Duplex DNA // J. Phys. Chem. – 2009. – **113**. – P. 3235–3244.
4. Yathindra N., Sundaralingam M. Backbone Conformations in Secondary and Tertiary Structural Units of Nucleic Acids. Constraint in the Phosphodiester Conformation // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. – 1974. – **71**. – P. 3325–3328.
5. Николаєнко Т. Ю., Булавін Л. А., Говорун Д. М. Структурно-динамічні особливості модельних цукрово-фосфатних залишків 3'-дезоксирибонуклеотидів // Доп. НАН України. – 2009. – № 12. – P. 75–82.
6. Gaussian 03, Revision C.02 / Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Montgomery J. A. Jr., Vreven T., Kudin K. N., Burant J. C., Millam J. M., Iyengar S. S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalmani G., Rega N., Petersson G. A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J. E., Hratchian H. P., Cross J. B., Bakken V., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R. E., Yazyev O., Austin A. J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J. W., Ayala P. Y., Morokuma K., Voth G. A., Salvador P., Dannenberg J. J., Zakrzewski V. G., Dapprich S., Daniels A. D., Strain M. C., Farkas O., Malick D. K., Rabuck A. D., Raghavachari K., Foresman J. B., Ortiz J. V., Cui Q., Baboul A. G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B. B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R. L., Fox D. J., Keith T., Al-Laham M. A., Peng C. Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P. M. W., Johnson B., Chen W., Wong M. W., Gonzalez C., Pople J. A. – Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
7. Sugeta H., Miyazawa T. General method for calculating helical parameters of polymer chains from bond lengths, bond angles, and internal-rotation angles // Biopolymers. – 1967. – **5**. – P. 673–679.
8. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – Москва: Мир, 1987. – 584 с.
9. Sarai A., Mazur J., Nussinov R., Jernigan R. L. Origin of DNA helical structure and its sequence dependence // Biochemistry. – 1988. – **27**. – P. 8498–8502.
10. Pauling L., Corey R. B. A Proposed Structure For The Nucleic Acids // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. – 1953. – **39**. – P. 84–97.
11. Allemand J. F., Bensimon D., Lavery R., Croquette V. Stretched and overwound DNA forms a Pauling-like structure with exposed bases // Ibid. – 1998. – **95**. – P. 14152–14157.
12. Day L. A., Wiseman R. L., Marzec C. I. Structure models for DNA in filamentous viruses with phosphates near the center // Nucl. Acids Res. – 1979. – **7**. – P. 1393–1403.
13. Liu D. J., Day L. A. Pfl virus structure: helical coat protein and DNA with paraxial phosphates // Science. – 1994. – **265**. – P. 671–674.

Київський національний університет

ім. Тараса Шевченка

Інститут молекулярної біології та генетики

НАН України, Київ

Інститут високих технологій Київського національного

університету ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 19.02.2010



**I. S. Voiteshenko, R. O. Zhurakivsky,**  
Academician of the NAS of Ukraine **L. A. Bulavin,**  
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **D. M. Hovorun**

### **Conformation analysis of a low-molecular model of anionic sugar-phosphate DNA chain**

*The complete conformation analysis of a low-molecular compound which models the anionic sugar-phosphate frame of DNA is first considered by the quantum-mechanical method at the level of MP2/6-311++g(2df,pd) // DFT B3LYP/6-31++g(d,p) theory. It is found that only 12 from all possible conformers can be formative for the sugar-phosphate frame of A-like DNA forms. Prototype conformers of the sugar-phosphate frame of DNA B-forms are not registered. It is found that 231 conformers are sugar-phosphate frame prototypes of P-like DNA form. The found conformers are within a wide range of sugar conformations, among which the most numerous are C1'-exo and C3'-endo.*