



УДК 577.3

© 2010

Р. О. Жураківський, член-кореспондент НАН України Д. М. Говорун

Конформаційні можливості 2'-дезоксипурину: квантово-механічне дослідження методом функціонала густини

Квантово-механічним методом функціонала густини на рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) проведено вичерпний конформаційний аналіз біологічно важливого нуклеозиду 2'-дезоксипурину. Наведено основні геометричні, енергетичні та полярні характеристики всіх виявлених 103 стійких конформерів, а також конформаційні рівноваги при температурі 298,15 К.

Дослідження конформаційних властивостей ізольованих нуклеозидів є класичною проблемою сучасної біохімії, молекулярної фармакології та структурної біології [1, 2]. Саме в цій площині лежать відповіді, які дозволяють зрозуміти принципи дії біологічно активних нуклеозидів і “молекулярну логіку” просторової будови та функціонування нуклеїнових кислот.

У попередніх наших роботах реалізовано новий підхід до теоретичного конформаційного аналізу 2'-дезоксирибонуклеозидів: квантово-механічним методом функціонала густини на рівні теорії MP2/6-311G++(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) вперше отримано повне конформаційне сімейство 1',2'-дидезоксирибози — модельного цукрового залишку [3] — і на його основі проведено повний конформаційний аналіз усіх канонічних нуклеозидів — 2'-дезоксцитидину [4], тимідину [5], 2'-дезоксиаденозину [6] та 2'-дезоксигуанозину [7].

Дана робота присвячена повноформатному квантово-механічному конформаційному аналізу 2'-дезоксипурину (dP).

Матеріали і методи. Для вивчення конформаційних властивостей dP використано теорію функціонала густини (DFT) із застосуванням гібридного обмінно-кореляційного функціонала електронної густини в узагальненому градієнтному наближенні B3LYP [8–10]. Для оптимізації геометрії ми скористалися стандартним набором базисних функцій 6-31G(d,p), які задовільно зарекомендували себе для подібних задач [3–7]. Усі зоптимізовані конформери перевірено на стійкість за відсутністю уявних частот в їхніх коливальних спектрах. Коливальні спектри отримано на згаданому рівні теорії у гармонічному наближенні.

Усі квантово-механічні розрахунки проведено з використанням програмного пакета “GAUSSIAN03” для платформи Win32 [11].

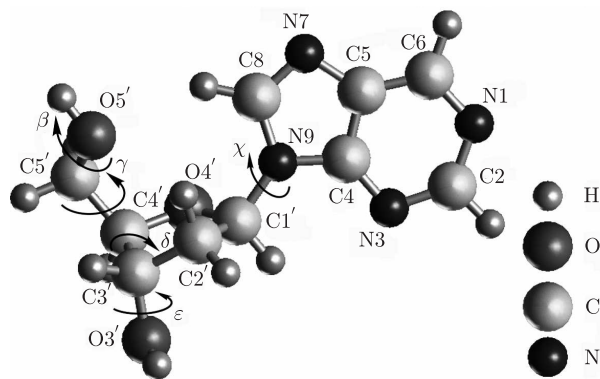


Рис. 1. Структура та позначення атомів молекули 2'-дезоксипурину та її основних конформаційних змінних

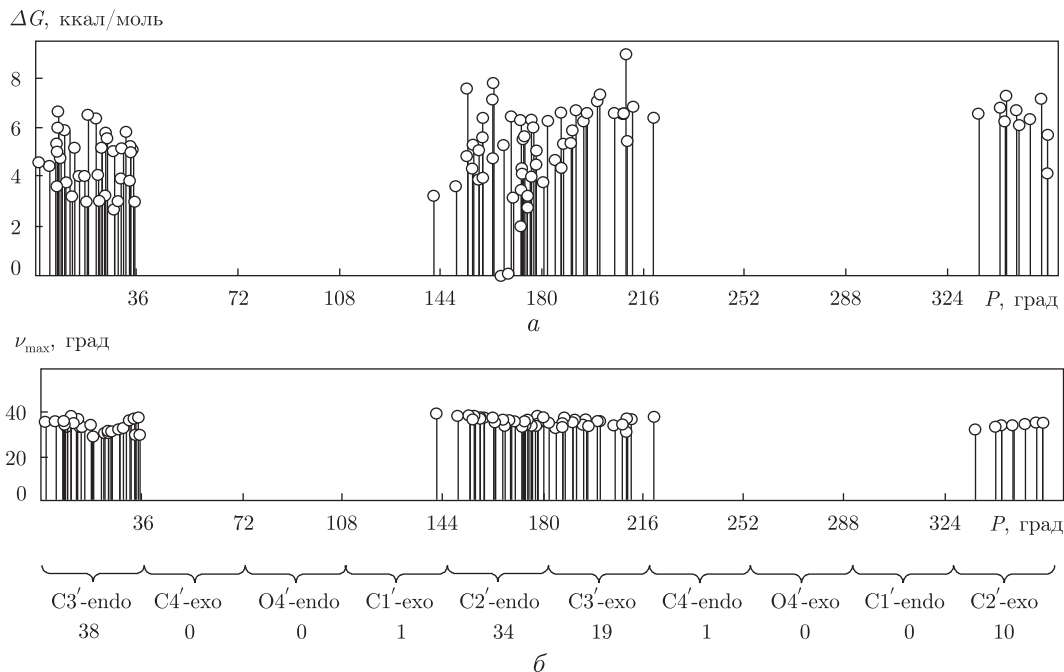


Рис. 2. Залежність відносної вільної енергії Гіббса (ΔG) (а) та максимального вигину кільця цукрового залишку (ν_{\max}) (б) від фазового кута псевдообертання фуранозного кільця цукрового залишку (P) усіх можливих конформерів 2'-дезоксипурину

Використані у роботі позначення класичних конформаційних змінних (рис. 1) — стандартні [12]. За міру конформаційної мінливості того чи іншого структурного параметра — довжини зв'язку чи величини валентного кута — взято безрозмірну величину Δ , що є відношенням стандартного відхилення величини структурного параметра до його середнього значення.

Результати та їхнє обговорення. Конформаційні властивості. Вперше встановлено, що ізолюваний dP має 103 пари дзеркально-симетричних стійких конформерів, відносна енергія Гіббса яких лежить у діапазоні 0–8,89 ккал/моль за нормальних умов (табл. 1, рис. 2). За своїми конформаційними ознаками та кількістю вони розподілені таким чином (табл. 1, рис. 3).

Таблиця 1. Деякі структурні, енергетичні та полярні характеристики повного сімейства конформерів 2'-дезоксипурину

Конформер	ΔG	D	P	ν_{\max}	χ	β	γ	δ	ε
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0,00	3,74	165,5	36,0	55,6	68,1	45,7	146,1	-177,4
2	0,04	3,58	168,4	36,2	55,8	68,8	45,1	151,0	-64,8
3	1,98	2,90	172,9	34,8	56,8	70,9	43,3	143,2	45,9
4	2,65	2,73	28,4	31,7	65,1	171,8	-59,1	89,1	-59,9
5	2,69	4,14	174,8	35,8	67,7	-56,8	173,4	154,5	-61,0
6	2,96	3,76	18,6	32,8	84,8	165,7	48,8	87,8	-104,0
7	2,97	3,26	29,6	32,3	45,4	46,6	42,1	89,7	-84,6
8	2,98	3,90	35,5	29,5	47,4	45,9	44,9	90,0	-149,9
9	3,00	2,57	23,0	29,7	67,5	-56,6	178,5	94,5	-85,4
10	3,12	4,96	170,0	35,7	67,7	-55,7	172,7	148,8	-179,3
11	3,15	5,24	13,2	36,8	-175,7	-78,9	-58,6	83,7	-61,9
12	3,17	3,23	175,1	34,7	68,6	176,8	-68,1	153,2	-65,1
13	3,19	3,50	24,9	30,4	70,5	-57,4	179,0	89,9	-161,3
14	3,21	4,23	141,9	38,9	-110,9	64,8	59,9	135,0	-177,4
15	3,40	6,50	172,9	33,3	-125,6	175,5	51,0	145,2	175,1
16	3,58	3,83	149,5	38,0	176,3	63,8	55,1	139,5	178,7
17	3,58	5,01	8,1	36,0	-179,5	176,5	-58,8	86,5	-57,7
18	3,61	5,62	9,6	33,6	-152,4	172,4	51,3	85,6	-166,0
19	3,72	4,47	180,5	37,3	42,6	-71,7	161,4	157,4	-58,8
20	3,76	6,42	10,9	34,6	-149,9	164,2	48,0	87,8	-89,1
21	3,77	5,19	33,5	36,5	-125,6	177,9	-57,6	83,7	-55,6
22	3,86	5,04	157,5	36,6	-104,8	67,0	64,5	147,0	-64,5
23	3,86	4,03	30,4	33,0	66,3	-77,4	-58,7	86,6	-65,3
24	3,87	5,37	158,8	36,4	175,3	65,0	55,2	147,1	-68,0
25	3,97	4,01	15,7	33,3	-129,6	67,1	64,1	87,3	-165,2
26	3,98	7,54	175,9	33,5	-122,5	174,4	50,3	150,1	-65,2
27	3,99	4,36	176,4	35,0	68,7	-75,7	-66,6	153,8	-66,8
28	3,99	4,37	17,7	33,9	-128,3	66,6	61,8	90,1	-85,9
29	4,03	4,22	22,6	30,0	68,2	-59,0	-179,8	85,9	57,0
30	4,07	3,11	359,5	34,5	156,7	63,8	53,9	89,0	-163,5
31	4,09	3,21	173,3	35,6	69,1	179,3	-66,1	150,8	-176,0
32	4,32	5,96	155,3	36,9	-132,3	-178,6	-68,4	145,5	-65,5
33	4,32	4,11	173,3	35,2	68,6	-69,0	-63,8	149,4	-177,4
34	4,37	3,27	187,1	34,6	72,7	-56,5	173,9	149,2	42,4
35	4,38	5,67	178,1	37,0	43,4	-70,6	160,6	152,6	-178,4
36	4,39	3,55	5,2	35,2	162,1	62,6	51,0	89,9	-90,3
37	4,44	3,58	178,0	34,8	69,4	98,1	-69,1	153,9	-60,4
38	4,53	2,63	1,9	35,3	178,7	-54,8	-179,9	87,9	-170,9
39	4,67	5,25	184,8	32,6	-120,0	178,0	48,9	143,6	56,0
40	4,70	6,14	9,4	33,2	-151,8	176,5	52,4	81,8	65,7
41	4,72	4,85	162,3	36,7	-121,7	-49,5	172,1	150,1	-61,2
42	4,79	4,95	153,9	37,6	-129,0	-49,8	172,8	142,2	179,9
43	4,94	3,01	8,0	35,3	-175,6	-53,9	179,1	90,6	-80,6
44	4,94	5,24	34,0	29,7	46,6	45,1	45,8	85,2	58,8
45	5,00	2,86	28,2	31,9	70,4	-174,6	-170,3	86,0	-162,8

Таблиця 1. Продовження

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
46	5,03	2,91	178,1	34,5	-120,1	-47,7	170,7	146,9	48,4
47	5,03	4,83	35,0	37,3	-127,5	-79,5	-57,9	81,7	-59,8
48	5,08	4,23	24,0	30,4	67,2	59,9	-176,6	90,5	-92,2
49	5,08	5,50	157,8	37,1	-131,2	-77,0	-67,7	147,0	-67,9
50	5,09	4,66	14,2	33,0	-128,6	67,0	64,6	83,5	63,2
51	5,11	2,59	24,1	30,3	65,7	-167,8	-170,0	91,6	-83,2
52	5,14	3,74	31,6	35,7	-137,8	-54,7	178,1	87,9	-78,3
53	5,19	2,88	166,5	33,8	-102,9	71,3	66,1	140,9	54,8
54	5,23	3,86	34,2	37,0	73,5	40,8	-69,7	79,3	-166,8
55	5,24	4,54	156,0	37,8	-141,7	-68,5	-64,4	143,1	-179,4
56	5,27	5,73	8,2	35,4	-157,3	-87,3	53,5	83,6	-176,1
57	5,28	3,43	7,6	35,4	-175,2	-56,8	-178,9	81,9	62,5
58	5,30	3,53	187,9	37,4	41,6	-73,9	164,0	152,0	34,6
59	5,32	1,16	190,5	35,3	74,6	176,0	-67,6	151,2	41,9
60	5,35	2,77	210,4	36,4	176,3	-178,4	-66,5	154,6	48,6
61	5,46	7,05	173,7	33,5	-126,3	-88,8	53,1	146,2	173,8
62	5,52	4,68	25,6	30,6	70,5	65,1	-175,1	87,0	-161,7
63	5,55	4,77	159,2	37,5	-161,0	73,9	-74,5	144,3	175,1
64	5,58	4,69	173,8	35,4	69,4	84,7	-71,1	149,8	179,2
65	5,66	4,93	359,7	34,0	159,5	64,4	54,2	85,1	64,7
66	5,71	3,28	25,3	31,1	67,6	-173,5	-169,4	82,4	57,1
67	5,80	4,40	32,3	35,7	70,7	50,8	-67,7	76,2	55,9
68	5,82	2,98	10,6	38,1	179,4	42,1	-70,0	79,6	-173,0
69	5,83	3,27	190,7	34,8	74,0	-69,1	-63,8	149,8	46,8
70	5,84	3,64	12,5	37,8	-177,0	50,5	-68,4	75,2	60,7
71	5,94	6,13	8,4	35,0	-155,4	-87,4	52,8	79,7	65,6
72	5,96	7,66	177,1	33,8	-123,5	-85,9	52,9	151,4	-60,7
73	6,05	3,46	349,4	34,3	171,1	178,9	-175,4	90,7	-171,7
74	6,19	4,56	344,6	33,5	171,8	62,0	177,2	93,1	-171,1
75	6,22	3,64	172,6	35,4	-128,6	-176,2	-67,4	145,8	49,4
76	6,24	5,58	182,1	34,7	70,8	59,2	177,9	153,8	-63,3
77	6,26	5,62	176,1	34,3	69,8	59,3	178,3	147,5	178,9
78	6,26	6,06	194,8	34,0	-160,0	48,6	161,1	152,4	175,1
79	6,31	4,01	353,4	34,4	173,8	179,8	-173,8	84,8	62,6
80	6,32	1,91	195,9	35,8	75,6	-157,8	-175,1	150,7	41,1
81	6,34	3,98	219,7	37,6	-171,8	-179,3	174,2	153,9	48,6
82	6,34	5,29	159,1	37,2	-135,8	84,9	-71,9	147,4	-58,8
83	6,35	5,47	21,7	29,5	67,7	67,4	-175,7	84,2	60,4
84	6,39	3,31	169,0	35,3	-128,8	-69,3	-64,2	143,5	54,5
85	6,44	3,16	19,0	28,6	66,9	171,6	-71,2	88,4	44,2
86	6,50	2,33	335,2	31,6	164,9	-178,6	-63,2	102,5	-159,7
87	6,50	6,40	208,9	34,4	-169,8	-177,7	173,5	158,5	-62,1
88	6,54	5,70	206,0	33,6	-169,2	-179,9	172,0	153,3	174,8
89	6,54	5,50	187,1	33,2	-120,0	-87,9	50,6	145,4	52,7
90	6,55	7,04	196,2	34,4	-157,6	45,3	159,9	157,1	-65,0
91	6,59	6,32	8,4	34,1	-158,2	-82,9	55,8	89,2	-79,3

Таблиця 1. Закінчення

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
92	6,64	2,69	192,1	35,5	75,1	85,6	-72,2	150,8	39,6
93	6,65	4,35	348,7	33,5	171,9	-176,2	-175,2	95,7	-78,9
94	6,77	4,95	342,6	32,8	173,3	56,1	174,2	98,3	-83,9
95	6,81	5,04	212,0	36,3	-163,1	52,9	165,4	152,5	51,0
96	6,99	3,25	199,7	35,2	-141,0	-32,1	164,4	153,2	48,9
97	7,08	5,96	162,6	36,6	82,7	-76,2	54,6	147,0	-61,5
98	7,11	4,09	357,2	34,6	176,3	176,1	-71,2	86,5	51,6
99	7,22	5,45	345,0	33,3	173,5	63,8	176,5	89,1	66,0
100	7,24	3,92	200,6	35,4	78,2	60,6	175,7	150,4	45,9
101	7,52	5,69	153,9	38,4	81,2	-82,6	50,6	139,9	177,4
102	7,70	3,19	162,9	35,6	-134,6	71,9	-75,3	140,3	49,8
103	8,89	3,51	210,0	31,0	95,9	-60,9	74,1	144,8	50,6

Примітка. Позначення кутів β , γ , δ , ε , χ , P та ν_{\max} — стандартні [1], величини кутів наведено в градусах; ΔG — відносна вільна енергія Гіббса за нормальних умов, ккал/моль; D — дипольний момент, Дебай. Структурні характеристики отримано на рівні теорії DFT B3LYP/6-31G(d,p), а енергетичні — на рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p). Конформери пронумеровано в порядку зростання їхньої вільної енергії Гіббса (ΔG).

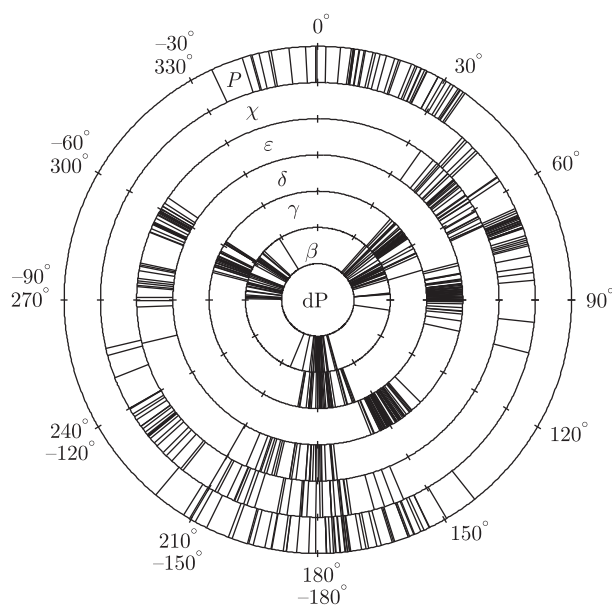


Рис. 3. Конформаційні кільця для основних структурних параметрів конформерів 2'-дезоксипурину

Суп-орієнтація цукрового залишку відносно нуклеотидної основи зафіксована в 44 конформерах ($41,6^\circ \leq \chi_{\text{syn}} \leq 95,9^\circ$), а anti-орієнтація ($156,7^\circ \leq \chi_{\text{anti}} \leq 179,4^\circ$; $-179,5^\circ \leq \chi_{\text{anti}} \leq -102,9^\circ$) — у 59 конформерах. Переважаюча кількість анти-конформерів та значно більший діапазон їхніх торсійних кутів χ вказує на те, що для них стеричні обмеження, зумовлені невалентною взаємодією між цукровим залишком та основою, менші, ніж для суп-конформерів.

Формально кількість конформерів з північною (N) конформацією фуранозного кільця цукрового залишку ($335,2^\circ < P_N < 360^\circ$; $0^\circ \leq P_N < 35,5^\circ$) помітно менша — їх 48,

ніж кількість конформерів з південною (S) конформацією фуранозного кільця ($141,9^\circ < P_S < 219,7^\circ$) — їх 55. Ширший діапазон кутів псевдообертання P в останньому випадку свідчить про те, що S-конформери стерично менше обмежені, ніж N-конформери. При цьому S- та N-конформери не зводяться лише до “класичних” C2'-endo та C3'-endo відповідно. Хоча кількість останніх у загальній чисельності свого підсімейства є максимальною — 34 та 38 відповідно, проте поряд з ними спостерігаються й інші: 19 конформерів C3'-exo, 10 конформерів C2'-exo і по одному конформеру C1'-exo та C4'-endo.

Розподіл значень торсійних кутів γ для всіх можливих конформерів dP — тримодальний. При цьому вони займають три доволі вузькі сектори: g^+ ($42,1^\circ \leq \gamma_{g^+} \leq 74,1^\circ$) — 33 конформери, t ($159,9^\circ \leq \gamma_t \leq 180,0^\circ$; $-180,0^\circ \leq \gamma_t \leq -169,4^\circ$) — 39 конформерів і g^- ($-75,3^\circ \leq \gamma_{g^-} \leq -57,6^\circ$) — 31 конформер. Тримодальний розподіл також встановлено для кутів β , які займають ті ж самі сектори g^+ , t і g^- : g^+ ($40,8^\circ \leq \beta_{g^+} \leq 85,6^\circ$) — 38 конформерів, t ($164,2^\circ \leq \beta_t \leq 180,0^\circ$; $-180,0^\circ \leq \beta_t \leq -157,8^\circ$) — 29 конформерів і g^- ($-88,8^\circ \leq \beta_{g^-} \leq -32,1^\circ$) — 35 конформерів. Один конформер має значення кута β $98,1^\circ$, що прилягає до сектора g^+ . Для кутів ε маємо сектори, що тільки частково збігаються із стандартними g^+ , t і g^- : g^+ ($34,6^\circ \leq \varepsilon_{g^+} \leq 66,0^\circ$) — 35 конформерів, t ($173,8^\circ \leq \varepsilon_t \leq 180^\circ$; $-180^\circ \leq \varepsilon_t \leq -159,7^\circ$) — 30 конформерів і g^- ($-89,1^\circ \leq \varepsilon_{g^-} \leq -55,6^\circ$) — 34 конформери, крім того, один конформер, що має значення кута ε $-149,9^\circ$, прилягає до сектора t , а три інших із значеннями $-104,0^\circ$, $-92,2^\circ$, $-90,3^\circ$ — до сектора g^- . Торсійні кути δ поділяються на два сектори: $75,2^\circ \leq \delta \leq 102,5^\circ$ та $135,0^\circ \leq \delta \leq 158,5^\circ$.

Таким чином, спостерігається приблизно рівномірний кількісний розподіл можливих конформерів dP за класичними торсійними кутами γ , β і ε у секторах g^+ , t і g^- .

Привертає до себе увагу те, що повне конформаційне сімейство досліджуваного нуклеозиду містить лише чотири ДНК-подібні конформери — **18**, **20**, **15** і **26**, які відповідають AI, AII, VI і VII формам двоспіральної ДНК [13].

Вивчаючи структурні особливості всіх можливих конформерів dP, ми не обмежилися лише аналізом їхніх основних (номенклатурних) характеристик, а дослідили конформаційну мінливість усіх без винятку структурних параметрів, а саме — довжин хімічних зв'язків, величин валентних кутів та торсійних кутів, що описують неплосцинність гетероциклу основи та вихід глікозидного зв'язку із середньої площини гетероциклу основи. При цьому встановлено такі закономірності.

Нуклеотидна основа у складі нуклеозиду є практично пласкою: ми не зафіксували статистично значущого її відхилення від планарності порівняно з ізольованою основою — пурином.

Іншою структурною особливістю конформерів dP є вихід глікозидного зв'язку C1'N9 із площини основи. Згідно з отриманими результатами кут виходу зв'язку C1'N9 із площини основи не перевищує $1,6^\circ$.

З-поміж усіх хімічних зв'язків нуклеозиду конформаційно найчутливішим є глікозидний зв'язок C1'N9 — для нього параметр Δ становить 0,0071, довжина зв'язку змінюється в межах 1,446–1,488 Å, а середнє значення дорівнює 1,463 Å. Наступним у списку йде зв'язок C4N9, для якого $\Delta = 0,0019$, довжина зв'язку змінюється в межах 1,375–1,387 Å, а середнє значення становить 1,381 Å. Для порівняння зазначимо, що для зв'язків N3C4, N7C8 та C8H основи $0,001 \leq \Delta \leq 0,0016$, а зв'язки N1C2, N1C6, C2N3, C2H, C4C5, C5C6, C5N7, C8C9 та C6H основи є конформаційно найменш чутливими ($\Delta < 0,001$). У цукровому залишку найбільші значення Δ мають зв'язки C1'O4' — 0,0043, C4'O4' — 0,0043 та C5'O5' — 0,0041, а мінімальне значення Δ встановлено для зв'язку O3'H — 0,0012. Таким чином, хі-

мічні зв'язки цукрового залишку загалом конформаційно лабільніші, ніж хімічні зв'язки основи.

Така ж сама закономірність виявлена і для валентних кутів: валентні кути цукрового залишку конформаційно лабільніші, ніж валентні кути основи. У основі значення параметра Δ для них змінюються від 0,0004 (N1C6H) до 0,0042 (N3C4N9). У цукровому залишку ці зміни значно більші і сягають 0,0265 (C2'C3'O3'). При цьому ще п'ять валентних кутів мають високі значення Δ : O3'C3'H — 0,0247, C4'C3'O3' — 0,0231, O5'C5'H1 — 0,0229, O5'C5'H2 — 0,0223 і C4'C5'O5' — 0,0217; мінімальне значення Δ зафіксовано для кута H1C5'H2 — 0,0035.

Таким чином, за всіма структурними ознаками азотиста основа досліджуваного нуклеозиду є конформаційно консервативнішою, ніж цукровий залишок.

Щодо полярних властивостей, то нуклеозид має значний дипольний момент, який сильно змінюється від конформера до конформера і лежить у межах 1,16-7,66 Д.

Конформаційні рівноваги. Спираючись на енергетичні характеристики всіх без винятку конформерів dP, ми чисельно охарактеризували його конформаційні рівноваги при температурі 298,15 К. Виявилось, що рівновага sup:anti за температури 298,15 К майже повністю зсунута ліворуч (sup : anti = 98,2% : 1,8%), а рівновага S : N — у бік S-конформерів (S : N = 96,8% : 3,2%). При цьому встановлено такі співвідношення між “класичними” та “некласичними” конформерами фуранозного кільця цукрового залишку:

для S-підсімейства: C2'-endo — 96,5%, C1'-exo — 0,2%, C3'-exo — 0,2%;

для N-підсімейства: C3'-endo — 3,1%, C2'-exo — 0,1%;

заселеність підсімейства C4'-endo практично нульова — 0,001%.

Також нами визначено такі закономірності (у дужках наведено заселеності при $T = 298,15$ К). Конформери з $\gamma \in g^+$ (96,8%) домінують над конформерами з $\gamma \in t$ (1,6%) та з $\gamma \in g^-$ (1,6%). Конформери з $\beta \in g^+$ (96,1%) домінують над конформерами з $\beta \in t$ (1,9%) і з $\beta \in g^-$ (2,0%); при цьому конформери $\beta \in g^+$ є sup-любними (95,4% проти 0,7%), для інших конформерів ситуація така ж: $\beta \in t$ — 1,2% проти 0,7%, $\beta \in g^-$ — 1,7% проти 0,4%. Конформери з $\varepsilon \in t$ (49,9%) переважають над конформерами з $\varepsilon \in g^-$ (48,2%) та з $\varepsilon \in g^+$ (1,9%); при цьому всі конформери є sup-любними: $\varepsilon \in t$ — 49,1% проти 0,8%, $\varepsilon \in g^-$ — 47,3% проти 0,9%, $\varepsilon \in g^+$ — 1,8% проти 0,1%.

Таким чином, вперше проведено вичерпний конформаційний аналіз біологічно активного нуклеозиду 2'-дезоксипурину квантово-механічним методом функціонала густини на рівні теорії MP2/6-311 + +G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p). Встановлено основні геометричні, енергетичні та полярні характеристики всіх його 103 стійких конформерів, а також конформаційні рівноваги при температурі 298,15 К.

Автори висловлюють щирі вдячність корпорації “GAUSSIAN” (США) за люб'язно наданий грант — програмний пакет “GAUSSIAN03” для платформи Win32.

1. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. — Москва: Мир, 1987. — 584 с.
2. Микельсон А. Химия нуклеозидов и нуклеотидов. — Москва: Мир, 1966. — 668 с.
3. 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. — С. 207–213.
4. Жураківський Р. О., Говорун Д. М. Вичерпний конформаційний аналіз канонічного нуклеозиду 2'-дезокситидину квантово-механічним методом функціоналу густини // Фізика живого. — 2006. — 14, № 3. — С. 35–48.

5. Yurenko Ye. P., Zhurakivsky R. O., Ghomi M., Samijlenko S. P., Hovorun D. M. How many conformers determine the thymidine low-temperature matrix infrared spectrum? The DFT and MP2 quantum chemical study // J. Phys. Chem. B. – 2007. – **111**, No 32. – P. 9655–9663.
6. Жураківський Р. О., Говорун Д. М. Повний конформаційний аналіз дезоксиаденозину квантово-хімічним методом функціоналу густини // Біополімери і клітина. – 2007. – **23**, № 1. – С. 45–53.
7. Жураківський Р. О., Говорун Д. М. Повний конформаційний аналіз молекули 2'-дезоксигуанозину квантово-механічним методом функціоналу густини // Доп. НАН України. – 2007. – № 4. – С. 187–196.
8. Parr R. G., Yang W. Density Functional Theory of Atoms and Molecules. – New York: Oxford University Press, 1989. – 350 p.
9. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Phys. Rev. B. – 1988. – **37**. – P. 785–789.
10. Becke A. D. Density-functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact-exchange mixing // J. Chem. Phys. – 1996. – **104**. – P. 1040–1046.
11. Gaussian 03, Revision C. 02 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, Jr., J. A. Montgomery, T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, J. A. Pople. – Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
12. Seeman N. C., Rosenberg J. M., Suddath F. L., Parc Kim J. J., Rich A. A simplified alphabetical nomenclature for dihedral angles in the polynucleotide backbone // J. Mol. Biol. – 1976. – **104**. – P. 142–143.
13. Foloppe N., MacKerell Jr. Intrinsic conformational properties of deoxyribonucleosides: implicated role for cytosine in the equilibrium among the A, B, and Z forms of DNA // Biophys J. – 1999. – **76**. – P. 3206–3218.

Інститут молекулярної біології
і генетики НАН України, Київ

Надійшло до редакції 09.04.2009

R. O. Zhurakivsky, Corresponding Member of the NAS of Ukraine **D. M. Hovorun**

2'-deoxypurine conformational possibilities: the DFT quantum mechanical investigation

Comprehensive conformational analysis of biologically important nucleoside 2'-deoxypurine is performed by means of the density functional theory at MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) level. Main geometric, energetic, and polar characteristics of all its 103 conformers are presented, as well as conformational equilibria at 298.15 K.