



УДК 577.3

© 2011

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

**Конформаційні властивості 1',2'-дидезоксирибози —
модельного цукрового залишку
дезоксирибонуклеозидів: порівняння результатів,
отриманих методами MP2 та DFT**

Квантово-механічним методом ab initio на рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) проведено повний конформаційний аналіз молекули 1',2'-дидезоксирибози — модельного цукрового залишку рибонуклеозидів. Встановлено, що з 55 можливих її конформерів лише два — S і N типу — можуть бути залучені в періодичну структуру дволанцюгової ДНК і є твірними її B- і A-форм відповідно. Наведено основні геометричні, енергетичні та полярні характеристики всіх стійких конформерів, а також конформаційні рівноваги за нормальних умов. Методом аналізу топології електронної густини отримано дані щодо внутрішньомолекулярних H-зв'язків.

Теоретичне дослідження конформаційних властивостей молекули 1',2'-дидезоксирибози квантово-механічним методом MP2 становить інтерес з декількох причин. Насамперед, ця молекула є найпростішою з-поміж відомих [1, 2] моделлю цукрового залишку як канонічних, так і модифікованих за нуклеотидною основою рибонуклеозидів. У свою чергу, нуклеозиди є надзвичайно важливими об'єктами біохімії, молекулярної фармакології, структурної біології та молекулярної біофізики [3, 4]. Їхні конформаційні властивості, що лежать в основі біологічної активності, значною мірою визначаються конформаційними властивостями нуклеозидних цукрових залишків. Вичерпність конформаційної картини дозволяє краще зрозуміти внутрішню “логіку” будови цих сполук і фізичну природу їхньої біологічної доцільності: основна складність полягає в тому, що *a priori* сказати, яка саме конформація є компетентною для тих чи інших мішеней практично неможливо, бо критерій енергетичної вигідності зазвичай не спрацьовує. У той же час експериментальні методи, насамперед рентгеноструктурний аналіз, спектроскопія ЯМР та ІЧ-спектроскопія в умовах низькотемпературної матричної ізоляції [3, 5–7], дають інформацію лише про енергетично найвигідніші конформації, які реалізуються в кристалі, розчині та вакуумі відповідно. Таким чином, теоретичний аналіз є безальтернативним способом отримання найповніших даних щодо конформаційних можливостей як нуклеозидів, так і їхніх цукрових залишків у вільному стані.

Раніше в роботі [8] було наведено результати конформаційного аналізу 1',2'-дидезоксирибози методом функціонала густини (DFT). Тут ми порівнюємо їх з аналогічними результатами, отриманими методом MP2, що враховує кореляцію електронів.

Матеріали і методи. Конформаційні властивості 1',2'-дидезоксирибози вивчали спін-обмеженим методом Хартрі–Фока із застосуванням кореляційних поправок теорії збурень Молера–Плесета другого порядку (MP2), використовуючи стандартний набір базисних функцій 6-31G(d,p). Усі зоптимізовані конформери перевірено на стійкість за відсутністю уявних частот у їхніх коливальних спектрах на цьому ж рівні теорії. На отриманих геометріях зроблено обрахунки в одній точці методом MP2 з використанням базисного набору функцій 6-311++G(d,p).

За початковий набір конформерів взято геометрії, отримані методом DFT [8]. Основним припущенням для подальшого пошуку було те, що джерелами конформаційної мінливості є псевдообертання фуранозного кільця та повороти гідроксилів у положеннях 2', 3' та 5' і гідроксиметильної групи навколо відповідних ординарних зв'язків. Кут псевдообертання змінювали з кроком 36°, а торсійні кути гідроксилів та групи CH₂OH — з кроком 120°. Отже, шляхом одинарних поворотів гідроксилів навколо ординарних зв'язків з отриманого на першому кроці набору конформерів генерувалися нові і для них виконувалася процедура оптимізації геометрії. Якщо оптимізація закінчувалася появою нового стійкого конформера, то він теж брав участь у генерації нових стартових геометрій. Сімейство конформерів вважалось замкнутим, коли для всіх геометрій, що можуть бути отримані з поточного набору шляхом одинарних поворотів, процедуру оптимізації було вичерпано.

Це досить тривала процедура, оскільки вимагає оптимізації геометрії сотень стартових конформерів, проте, на відміну від більш формалізованих підходів, таких, наприклад, як послідовне сканування гіперповерхні потенціальної енергії, дозволяє вкластися в розумні часові межі.

Використані в роботі позначення конформаційних змінних — стандартні [9].

Коливальні спектри розраховували в гармонійному наближенні для оптимізованих структур. Спектрально-коливальні дані використовували також для обчислення відносної вільної енергії конформерів, а також ідентифікації внутрішньомолекулярних водневих (H) зв'язків. Наявність внутрішньомолекулярних H-зв'язків встановлювали методом аналізу топології електронної густини за Бейдером [10] за наявністю відповідних критичних точок, їхню енергію розраховували за формулою, наведеною в [11].

Усі квантово-механічні розрахунки проведено з використанням програмного пакета "GAUSSIAN03" для платформи Win32 [12].

Результати та їх обговорення. Структурні властивості. Вперше встановлено, що при використанні методу MP2 молекула 1',2'-дидезоксирибози (рис. 1) має 55 дзеркально-симетричних пар стійких конформацій (табл. 1, рис. 2). Зауважимо, що при розрахунках методом DFT було отримано 56 пар конформерів. Відносна вільна енергія Гіббса конформерів лежить у діапазоні 0–5,67 ккал/моль за стандартних умов. Їхній розподіл за кутом псевдообертання P є чотиримодовим, заселені такі діапазони: $0,3^\circ < P < 45,7^\circ$; $128,9^\circ < P < 165,8^\circ$; $220,6^\circ < P < 233,6^\circ$; $310,1^\circ < P < 339,5^\circ$.

Виявилося, що серед усіх можливих є лише два конформери — **15** C2'-endo (S) і **26** C1'-endo (N) (див. табл. 1), для яких орієнтація гідроксиметильної групи (описується кутом γ) та орієнтація гідроксильних груп у положеннях 5' і 3' відносно фуранозного кільця (описується кутами β і ε відповідно) попадають у діапазон орієнтацій ($\beta \in t$, $\gamma \in g^+$, $\varepsilon \in t$), характерних для ДНК. Це дозволяє зрозуміти логіку природи, яка для дволанцюгової ДНК

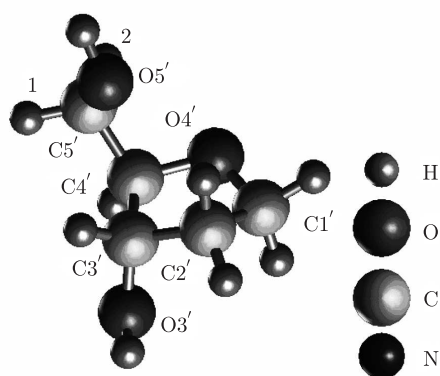


Рис. 1. Структура та позначення атомів 1',2'-дидезоксирибози

Таблиця 1. Деякі структурні, енергетичні та полярні характеристики знайдених конформерів 1',2'-дидезоксирибози

Конформер	ΔG	μ	P	ν_{\max}	β	γ	δ	ϵ	Внутрішньомолекулярні Н-зв'язки
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	0,00	2,27	138,8	42,3	55,8	57,7	136,4	-178,6	—
2	0,54	1,21	143,3	41,4	55,8	58,1	143,0	-64,6	C2'H2...O5'
3	0,69	2,89	7,6	38,6	52,1	62,2	85,5	-166,7	—
4	0,85	1,03	23,6	40,1	51,0	58,6	84,8	-82,1	—
5	0,89	4,63	152,3	40,9	-47,8	169,0	145,2	178,5	—
6	0,95	2,26	14,6	39,2	177,5	-57,4	83,8	-55,1	O3'H...O5'
7	0,97	2,37	160,7	39,8	-47,7	168,9	153,4	-59,2	—
8	1,15	2,17	140,7	40,5	57,3	57,4	132,9	58,1	—
9	1,22	2,30	150,8	40,6	-180,0	-68,8	146,7	-63,4	—
10	1,36	3,22	1,2	38,4	53,1	63,1	83,3	63,2	—
11	1,53	2,53	225,4	43,3	-42,8	169,5	165,3	42,7	—
12	1,57	3,31	339,5	39,3	-51,8	176,4	90,9	60,6	—
13	1,63	4,74	329,6	40,0	-49,8	175,6	100,6	-173,1	—
14	1,65	2,53	30,7	40,2	-51,0	175,1	84,7	-74,9	—
15	1,72	2,30	150,1	40,7	169,8	46,6	141,0	176,2	C2'H2...O5'
16	1,81	0,94	154,8	40,4	-74,7	-68,1	149,1	-65,6	—
17	1,82	1,96	150,8	41,1	-65,8	-64,8	143,5	-179,8	—
18	1,89	0,97	21,4	39,9	-76,4	-58,1	80,8	-59,4	O3'H...O5'
19	1,90	2,69	320,4	40,0	-48,2	175,0	111,3	-71,4	—
20	2,13	3,14	152,9	41,1	-177,1	-67,1	145,8	-179,3	—
21	2,24	2,91	155,1	39,6	168,1	46,4	147,1	-63,5	C2'H2...O5'
22	2,62	2,74	229,8	40,7	172,4	49,6	157,3	48,5	C2'H2...O5'
23	2,68	2,23	154,8	40,5	83,6	-71,6	148,8	-56,7	—
24	2,72	3,31	220,6	43,0	-174,3	-61,4	165,4	41,7	—
25	2,82	1,35	222,3	42,9	-67,3	-60,8	164,3	43,5	—
26	2,94	2,29	319,4	40,5	169,6	54,4	105,3	-172,4	C1'H2...O5'
27	2,97	4,71	33,3	41,9	41,6	-68,9	75,2	-173,9	O5'H...O3'
28	3,09	4,53	148,2	41,8	69,3	-74,2	141,8	176,1	—
29	3,19	3,47	25,2	40,9	49,8	-66,8	72,3	58,7	O5'H...O3'
30	3,30	2,89	320,0	40,0	164,4	52,8	109,3	-78,2	—
31	3,34	0,75	317,7	40,7	173,6	54,7	102,7	64,3	C1'H2...O5'

Таблиця 1. Продовження

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
32	3,62	3,91	139,6	42,7	52,9	175,0	133,9	179,4	—
33	3,83	4,14	37,9	40,2	63,0	-176,0	77,3	-174,1	—
34	3,91	3,61	151,0	41,2	-87,5	48,2	142,0	174,1	C2'H2...O5'
35	3,92	1,41	18,3	39,0	-174,8	-169,4	75,3	60,0	—
36	3,94	4,28	136,3	43,1	-171,9	-176,7	131,8	179,5	—
37	3,94	2,86	221,1	43,6	75,5	-69,5	165,0	40,3	—
38	3,96	1,74	128,9	42,7	-173,3	-175,7	121,2	54,5	—
39	4,02	2,77	2,0	39,4	-88,0	50,1	77,7	63,0	—
40	4,03	3,50	45,7	42,0	-176,6	-171,2	76,6	-175,3	—
41	4,11	2,77	152,3	40,8	49,2	172,4	146,2	-62,0	—
42	4,14	3,22	152,3	40,8	-168,7	-175,9	146,5	-58,0	—
43	4,30	3,50	226,7	45,1	-176,0	-176,6	164,9	41,2	—
44	4,34	2,71	45,6	42,0	-170,4	-170,6	81,0	-75,0	—
45	4,39	1,20	165,8	38,1	-86,5	48,0	144,5	52,7	C2'H2...O5'
46	4,41	3,06	156,8	40,1	-83,5	48,8	148,6	-58,4	C2'H2...O5'
47	4,44	2,31	42,1	41,1	55,7	-178,0	80,5	-79,6	—
48	4,45	3,61	25,3	41,5	-83,8	45,4	74,9	-179,5	—
49	4,46	3,56	323,2	40,8	-98,7	56,5	102,1	-176,8	—
50	4,50	1,73	324,6	40,8	-99,3	56,1	97,1	63,9	—
51	4,51	3,21	0,3	38,1	63,0	-176,3	79,9	63,6	—
52	4,56	3,24	311,8	40,1	-177,2	-58,6	113,8	-168,7	—
53	4,57	1,56	233,6	42,2	-84,7	48,5	158,4	46,7	C2'H2...O5'
54	4,74	2,10	310,1	40,5	-179,8	-60,5	111,2	59,2	—
55	5,67	2,96	315,2	40,2	-89,3	56,9	112,5	-70,0	C1'H2...O5'

Примітка. μ — дипольний момент, D ; ΔG — відносна вільна енергія Гіббса за нормальних умов, ккал/моль. Усі конформаційні параметри наведено у градусах. Структурні і полярні характеристики отримано на рівні теорії MP2/6-31G(d,p), а енергетичні — на рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p). Конформери пронумеровано у порядку зростання їхньої відносної енергії.

вибрала в процесі еволюції дві конформації цукрового залишку — S і N типу відповідно. S-конформація є твірною B-форми, а N-конформація — твірною A-форми ДНК. Ці конформації не є енергетично найвигіднішими: так, найменша відносна енергія з-поміж них становить $\Delta G_{15} = 1,72$ ккал/моль, при цьому різниця між мінімальною і максимальною енергіями цих двох конформацій становить $\Delta G_{25} - \Delta G_{15} = 1,22$ ккал/моль.

Кількість конформерів з північною (N) конформацією фуранозного кільця — 27, більша, ніж кількість конформерів з південною (S) конформацією кільця — 21, крім того, 7 конформерів лежать у східному (E) квадранті. Ширший діапазон кутів псевдообертання P та вужчий діапазон змін максимального вигину фуранозного кільця ν_{\max} (амплітуди псевдообертання) свідчить про те, що N-конформери стерично менше обмежені, ніж S-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 максимальна (15 та 12 відповідно), поряд з ними спостерігаються й інші — шість конформерів C1'-exo у S-підсімействі та вісім конформерів C1'-endo, чотири конформери C4'-exo і три C2'-exo у N-підсімействі, а також сім E-конформерів C4'-endo.

Розподіл значень торсійних кутів γ для всіх можливих конформерів 1',2'-дидезоксирибози — тримодальний (рис. 3). При цьому вони займають три доволі вузькі сектори: g^+ ($45,4^\circ \leq \gamma_{g^+} \leq 63,1^\circ$) — 21 конформер; t ($168,9^\circ \leq \gamma_t \leq 180,0^\circ$; $-180,0^\circ \leq \gamma_t \leq -169,4^\circ$) — 19 конформерів; g^- ($-74,2^\circ \leq \gamma_{g^-} \leq -57,3^\circ$) — 15 конформерів. Тримодальний розподіл

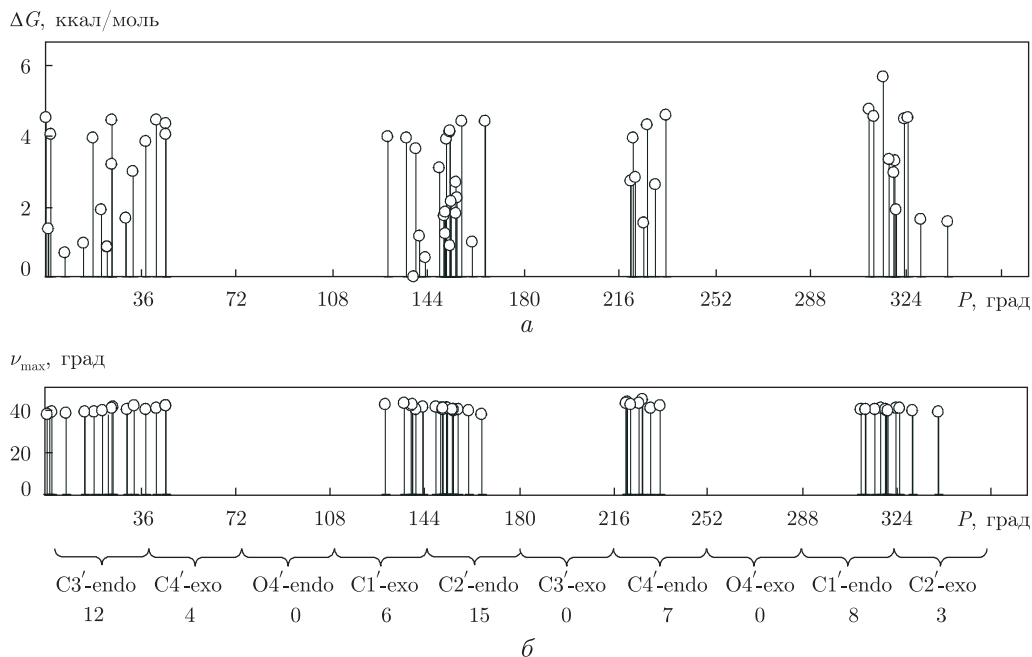


Рис. 2. Залежність відносної вільної енергії Гіббса ΔG (а) та максимального вигину кільця цукрового залишку ν_{\max} (б) від фазового кута псевдообертання фуранозного кільця цукрового залишку P можливих конформерів 1',2'-дидезоксирибози за нормальних умов. Вказано класичні конформаційні підсімейства та кількість конформерів у них

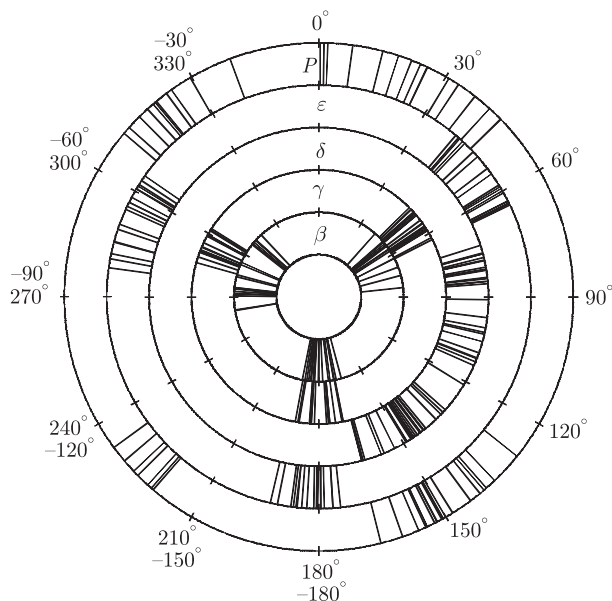


Рис. 3. Конформаційні кільця для основних структурних параметрів 1',2'-дидезоксирибози

також має місце і для кутів β , які займають ті ж самі сектори g^+ , t і g^- : g^+ ($41,6^\circ \leq \beta_{g^+} \leq 83,6^\circ$) – 16 конформерів; t ($164,4^\circ \leq \beta_t \leq 180,0^\circ$; $-180,0^\circ \leq \beta_t \leq -168,7^\circ$) – 19 конформерів; g^- ($-99,3^\circ \leq \beta_{g^-} \leq -42,8^\circ$) – 18 конформерів. Два конформери мають значення кута β $-99,3^\circ$ і $-98,7^\circ$, що прилягають до сектора g^- . Для кута ϵ розподіл та-

кож тримодальний: g^+ ($40,3^\circ \leq \varepsilon_{g^+} \leq 64,3^\circ$) – 19 конформерів; t ($174,1^\circ \leq \varepsilon_t < 180,0^\circ$; $-180,0^\circ < \varepsilon_t \leq -166,7^\circ$) – 18 конформерів; g^- ($-82,1^\circ \leq \varepsilon_{g^-} \leq -55,1^\circ$) – 18 конформерів. Торсійні кути δ розподілені у проміжку значень $72,3^\circ \leq \delta \leq 165,4^\circ$ майже рівномірно.

Таким чином, спостерігається приблизно рівномірний кількісний розподіл можливих конформерів 1',2'-дидезоксирибози за класичними торсійними кутами γ , β і ε у секторах g^+ , t і g^- і кутом δ поблизу секторів g^+ і t .

Характерно, що переважна більшість конформерів, отриманих методами MP2 і DFT, мають свої структурні відповідники і лише п'ять конформерів, розрахованих методом MP2 (19, 33, 38, 49, 50), таких відповідників не мають.

Кореляційні закономірності. Маючи у своєму розпорядженні дані для повного сімейства конформерів 1',2'-дидезоксирибози, ми застосували статистичні підходи, щоб виявити взаємозв'язок між номенклатурними торсійними кутами. Зафіксовано такі статистичні закономірності.

По-перше, має місце доволі сильна кореляція (за одним винятком, який наведемо останнім) між торсійним кутом δ і торсійними кутами ν_3 ($-0,99$), ν_2 ($0,93$), ν_1 ($0,73$), ν_4 ($-0,62$) і ν_0 ($-0,24$) (тут і нижче у дужках наведено коефіцієнт лінійної кореляції, визначений з врахуванням кругової корекції [13]). Крім того, спостерігається доволі сильна кореляція між торсійними кутами ν_1 та ν_2 ($0,93$), ν_0 ($-0,84$), ν_3 ($-0,69$), між ν_2 та ν_3 ($-0,91$), ν_0 ($-0,58$), між ν_3 та ν_4 ($0,66$), між ν_0 та ν_4 ($-0,61$). Найслабше корелюють між собою кути ν_2 та ν_4 ($-0,29$), ν_0 та ν_3 ($0,19$), ν_1 та ν_4 ($0,08$).

По-друге, встановлено, що торсійні кути β , γ , ε порівняно слабо корелюють як між собою, так і з торсійними кутами $\nu_0 - \nu_4$ (значення відповідних коефіцієнтів лінійної кореляції не перевищують за модулем $0,25$).

Щодо полярних властивостей 1',2'-дидезоксирибози: дипольний момент молекули змінюється від конформера до конформера і лежить у межах $0,75-4,74D$.

Конформаційні рівноваги. Спираючись на енергетичні характеристики всіх без винятку конформерів 1',2'-дидезоксирибози, ми чисельно охарактеризували його конформаційні рівноваги. Виявилось, що рівновага S : N при $T = 298,15$ K сильно зсунута праворуч (S : N = 67,5% : 32,5%). При цьому встановлені такі співвідношення між “класичними” та “некласичними” конформерами фуранозного кільця:

для S-підсімейства: C1'-exo – 43,2%, C2'-endo – 21,3%, C4'-endo – 3,0%;

для N-підсімейства: C3'-endo – 27,1%, C2'-exo – 3,8%, C1'-endo – 1,6%, C4'-exo – 0,1%.

Внутрішньомолекулярні водневі зв'язки. Основні фізичні параметри визначених внутрішньомолекулярних водневих (Н) зв'язків у конформерах 1',2'-дидезоксирибози наведено у табл. 1–3. У 55 конформерах нами зафіксовано чотири типи внутрішньомолекулярних Н-зв'язків загальною кількістю 13, а саме: C1'Н2...О5' (два зв'язки), C2'Н2...О5' (сім

Таблиця 2. Основні геометричні, електронно-топологічні та енергетичні характеристики внутрішньомолекулярних водневих зв'язків АН...В, які стабілізують конформери 1',2'-дидезоксирибози

Тип	Н-зв'язок АН...В	АВ, Å		НВ, Å		АНВ, град		ρ , а. о.		$\nabla^2\rho$, а. о.		$E_{НВ}$, ккал/моль	
		min	max	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max
1	C1'Н2...О5'	3,149	3,214	2,655	2,704	106,7	107,9	0,008	0,008	0,033	0,033	1,8	1,9
2	C2'Н2...О5'	2,863	3,195	2,423	2,628	101,7	113,8	0,009	0,013	0,034	0,053	2,0	3,2
3	О3'Н...О5'	2,887	2,951	2,144	2,214	131,9	132,4	0,017	0,018	0,054	0,059	4,6	4,9
4	О5'Н...О3'	2,928	2,962	2,113	2,179	137,1	140,9	0,018	0,019	0,056	0,059	4,8	5,2

Таблиця 3. Конформаційні характеристики внутрішньомолекулярних водневих зв'язків, які охоплюють можливі конформери 1',2'-дидезоксирибози

Тип	Н-зв'язок АН...В	Загальна кількість	N	S	β			γ			ε		
					g^+	t	g^-	g^+	t	g^-	g^+	t	g^-
1	C1'H2...O5'	2	2	0	0	1	1	2	0	0	1	0	1
2	C2'H2...O5'	7	0	7	0	3	4	7	0	0	3	2	2
3	O3'H...O5'	2	2	0	0	1	1	0	0	2	0	0	2
4	O5'H...O3'	2	2	0	2	0	0	0	0	2	1	1	0

зв'язків), O3'H...O5' (два зв'язки), O5'H...O3' (два зв'язки). Внутрішньоцукрові зв'язки C2'H2...O5' чутливі до конформації цукрового залишку: тип Н-зв'язків 2 реалізується лише в S-конформаціях, а типи 1, 3 і 4 — лише в N-конформаціях цукрового залишку.

Для деяких типів Н-зв'язків спостерігається також істотна залежність і від інших конформаційних параметрів (див. табл. 1, 3). Так, Н-зв'язки типів 1 та 2 реалізуються лише при $\gamma \in g^+$, зв'язки типу 3 — лише при $\gamma \in g^-$ і $\varepsilon \in g^-$, а Н-зв'язки типу 4 — лише при $\beta \in g^+$, $\gamma \in g^-$.

Отже, 13 конформерів 1',2'-дидезоксирибози мають по одному внутрішньомолекулярному Н-зв'язку, в 42 конформерах внутрішньомолекулярні Н-зв'язки відсутні.

Таким чином, у результаті повного конформаційного аналізу 1',2'-дидезоксирибози — модельного цукрового залишку рибонуклеозидів — неемпіричним квантово-механічним методом на рівні теорії MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) визначено основні геометричні, енергетичні та полярні характеристики усіх її 55 стійких конформерів, а також конформаційні рівноваги за нормальних умов. Методом аналізу топології електронної густини отримано дані щодо внутрішньомолекулярних Н-зв'язків.

Автори висловлюють вдячність корпорації "GAUSSIAN" (США) за наданий Д. М. Говоруну грант — програмний пакет "GAUSSIAN03" для платформи Win32.

1. Levitt M., Warshel A. Extreme Conformational Flexibility of the Furanose Ring in DNA and RNA // J. Am. Chem. Soc. — 1978. — **100**. — P. 2607–2613.
2. Краснокутский С. А., Иванов А. Ю., Шеина Г. Г., Благой Ю. П. Конформационная изомерия молекул рибозы и 2-деоксирибозы, изолированных в низкомолекулярных матрицах // Біофіз. вісник. — 2000. — No 488, вип. 6(1). — С. 49–55.
3. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. — Москва: Мир, 1987. — 584 с.
4. Химия биологически активных природных соединений / Под ред. Н. А. Преображенского, Р. П. Евстигнеевой. — Москва: Химия, 1970. — 512 с.
5. Жураківський Р. О., Говорун Д. М. Конформаційні властивості 1'-деоксирибози, модельного цукрового залишку рибонуклеозидів: квантово-механічне дослідження методом функціонала густини // Доп. НАН України. — 2008. — № 3. — С. 167–176.
6. Самійленко С. П. Роль цукрового залишку у взаємодії їх гуанозинових нуклеозидів з карбоксильною групою амінокислот за даними спектроскопії 1H ЯМР // Там само. — 2004. — № 2. — С. 186–191.
7. Krasnokutski S. A., Ivanov A. Yu., Izvekov V. et al. FTIR matrix isolation study of uridine, thymidine, ribose, and glucose // J. Mol. Struct. — 1998. — **482**, No 1. — P. 249–252.
8. Жураківський Р. О., Юренко Є. П., Говорун Д. М. Конформаційні властивості 1',2'-деоксирибози — модельного цукрового залишку 2'-деоксирибонуклеозидів: результати неемпіричного квантово-механічного дослідження // Доп. НАН України. — 2006. — № 8. — С. 207–213.
9. Seeman, N. C., Rosenberg J. M., Suddath F. L. et al. A simplified alphabetical nomenclature for dihedral angles in the polynucleotide backbone // J. Mol. Biol. — 1976. — **104**. — P. 142–143.
10. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. — Москва: Мир. — 2001. — 532 с.
11. Espinosa E., Molins E., Lecomte C. Hydrogen bond strengths revealed by topological analysis of experimentally observed electron densities // Chem. Phys. Lett. — 1998. — **285**. — P. 170–173.

12. *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.
13. *Kitamura K., Wakahara A., Mizuno H. et al.* Conformationally “concerted” changes in nucleotide structures. A new description using circular correlation and regression analyses // *J. Am. Chem. Soc.* – 1981. – **103**. – P. 3899–3904.

*Інститут молекулярної біології
і генетики НАН України, Київ*

Надійшло до редакції 08.04.2010

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

Conformational properties of 1',2'-dideoxyribose — the model sugar residue of deoxynucleosides: comparison of MP2 and DFT results

The full conformational analysis of a 1',2'-dideoxyribose molecule is performed at the MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) theory level. It is established that among 55 possible conformers only two of them — one of the N-type and one of the S-type — might be incorporated into the double-stranded periodic DNA structure and from its B- and A-forms, respectively. Main geometric, energetic, and polar characteristics of all stable conformers are presented, as well as conformational equilibria under normal conditions. By the quantum mechanical electron density topology analysis, the data on intramolecular hydrogen bonds are obtained.