

УДК 577.3

Глушенков А.М.<sup>1</sup>, аспірант  
Говорун Д.М.<sup>1,2</sup>, д.б.н., проф.

### Повне сімейство Н-зв'язаних гетероасоціатів $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$ : квантово- механічне дослідження

<sup>1</sup> Київський національний університет імені  
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.  
Глушкова 4г,  
e-mail: s4rduk4r@gmail.com

<sup>2</sup> Інститут молекулярної біології і генетики  
НАН України, 03680, м. Київ, вул. Академіка  
Заболотного 150,  
e-mail: dhovorun@imbg.org.ua

A. N. Glushenkov<sup>1</sup>, post.grad.stud.,  
D. N. Hovorun<sup>2</sup>, Dr.Sci., Prof.

### Complete family of H-bonded heteroassociates $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$ : quantum-mechanical study

<sup>1</sup> Taras Shevchenko National University of Kyiv,  
83000, Kyiv, Glushkova st., 4g,  
e-mail: s4rduk4r@gmail.com

<sup>2</sup> The Institute of Molecular Biology and Genetics of  
NASU, 03680, Kyiv, Zabolotnoho st., 150,  
e-mail: dhovorun@imbg.org.ua

На рівні квантово-механічної теорії  $MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p)$  у вакуумному наближенні вперше показано, що повне сімейство гетероасоціатів  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$ , що стабілізуються специфічними міжмолекулярними контактами, нараховує 26 структур у діапазоні відносних вільних енергій Гіббса  $0\div 36,77$  ккал/моль за нормальних умов. Глобальному мінімуму енергії відповідає канонічна Вотсон-Криківська пара. Ентальпія її утворення практично збігається з результатами мас-спектрометричного експерименту. Проаналізовано основні фізико-хімічні властивості міжмолекулярних Н-зв'язків, що стабілізують гетероасоціати.

Ключові слова: нуклеотидна основа, повне сімейство, гуанін-цитозин, гуанін, цитозин, водневий зв'язок.

For the first time on the  $MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p)$  theory level in vacuo it has been shown that complete family of  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  heteroassociates which are stabilized by specific intermolecular contacts counts 26 structures and occupy relative Gibbs energies diapason of  $0-36.77$  kcal/mol in standard conditions. Canonical Watson-Crick base pair has occupancy of 99,99% and corresponds to global minima of Gibbs free energy. It's stabilized by three H-bonds  $N2H\dots O2$ ,  $N4H\dots O6$  and  $N1H\dots N3$ . It's complexing enthalpy practically the same as results obtained in classical mass-spectrometry experiment. We've established that most energetically favourable heteroassociate which holds mutagenic tautomer has relative Gibbs energy of 9,73 kcal/mol and can be created through DPT-mechanism along neighboring antiparallel H-bonds of canonical WC base pair. For the first time classical mass-spectrometry experiment data has been theoretically explained for GC base pair. Has been performed detailed analysis of common physico-chemical properties and intermolecular H-bonds.

Keywords: nucleic base pair, complete family, guanine-cytosine, guanine, cytosine, hydrogen bond.

Статтю представив д.ф.-м.н. Анісімов І.О.

#### Вступ.

Специфічні взаємодії основ нуклеїнових кислот (ОНК) відіграють важливу роль у кодуванні генетичної інформації, просторовій структурі РНК, а також при конструюванні синтетичних ДНК для технологічних цілей. Вотсон і Крик вперше показали [3], що генетична інформація в ДНК кодується комплементарними парами  $\text{Gua}\cdot\text{Cyt}$  і  $\text{Ade}\cdot\text{Thy}$ . Мутації, в свою чергу,

можливі за рахунок утворення неправильних пар, зокрема, за участю рідкісних таутомерних форм ОНК [4], що призводить до утворення неканонічних пар та виникнення помилок при біосинтезі ДНК. Просторова структура РНК багато в чому визначається міжмолекулярними Н-зв'язками, утвореними між ОНК. Особливу увагу в літературі приділяють неканонічним парам ОНК, які при цьому спостерігаються [5-8].

В той же час синтетичні ДНК, в принципі, теж можуть містити неканонічні пари ОНК, в залежності від технологічного задуму.

Кожен із вказаних вище аспектів потребує знання геометричних і фізико-хімічних властивостей як окремих ОНК, так і повного сімейства їхніх Н-зв'язаних гомо- та гетероасоціатів.

#### Об'єкти та методи дослідження.

Мета роботи — отримати геометричні та основні фізико-хімічні властивості всіх можливих гетероасоціатів 9-метилгуанін ( $m^9\text{Gua}$ ) · 1-метилцитозин ( $m^1\text{Cyt}$ ) за участі усіх їхніх можливих таутомерних форм [9].

Вихідні структурні гіпотези генерували автоматично за допомогою оригінального алгоритму [10]. Квантово-механічні розрахунки геометричної та електронної будови досліджуваних об'єктів проводили на рівні теорії DFT B3LYP/6-311++G(d,p) у вакуумі. Всі зоптимізовані структури перевіряли на стійкість за відсутністю уявних частот у їхніх коливальних спектрах, розрахованих у гармонійному наближенні. Електронна енергія взаємодії основ у комплексах і відносна енергія Гіббса останніх визначалась на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p).

Квантово-механічні розрахунки проведено з використанням програмного пакету Gaussian 03 для Win32 (Gaussian 03, Revision E.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et. al.).

Міжмолекулярні Н-зв'язки ідентифікували за допомогою методу аналізу електронної густини QTAIM [10] з використанням хвильових функцій, отриманих на рівні теорії B3LYP/6-311++G(d,p). Додатково для ідентифікації Н-зв'язків СН...О/Н використовувався НВО-аналіз [2] і метод Грюненберга [11, 12]. Для розрахунку констант Грюненберга користувалися програмою Compliance 3.0.2 (<http://www.oc.tu-bs.de/Grunenberg/compliance.html>). Енергії класичних Н-зв'язків розраховували методом Югансена [13], а неканонічних СН...О/Н Н-зв'язків та ван-дер-Ваальсових контактів СН...Н — за методом Еспінози-Молінса-Лекомте [14].

#### Результати та їхнє обговорення.

Загальні фізико-хімічні властивості гетероасоціатів. Результати дослідження наведені в таблиці 1. Повне сімейство Н-зв'язаних гетероасоціатів  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  складається із 26 структур. До сімейства

належать як асоціати, що містять основні таутомерні форми основ  $m^9\text{Gua}$  і  $m^1\text{Cyt}$  (17 структур), так і їхні рідкісні таутомерні форми (9 структур). Найбільш енергетично вигідною структурою 1 є канонічна Уотсон-Криківська пара, яка має дипольний момент 6,43 дебай. Її заселеність за нормальних умов складає 99,99%. Енергетично найвигідніший гетероасоціат 3, який містить основи у мутагенній таутомерній формі, має відносну енергію Гіббса 9,73 ккал/моль та утворений подвійним перенесенням протонів вздовж сусідніх антипаралельних Н-зв'язків з конформера 1 [15].

Встановлено, що всі можливі гетероасоціати  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  асоційовані шістьма типами Н-зв'язків: NH...O/N, OH...O/N і CH...O/N. Енергії класичних Н-зв'язків знаходяться у діапазоні 1,26÷16,72 ккал/моль, а неканонічних СН...О/Н — у діапазоні 0,41÷3,99 ккал/моль (табл. 1). Для всіх специфічних контактів СН...О/Н НВО-аналіз показав наявність характерного перенесення заряду і дав усі підстави вважати їх справжніми Н-зв'язками ( $E^{(2)}=0,01\div4,45$ ) [16], тим більше, що всі вони мають додатне значення сталих Грюненберга. Єдиний випадок специфічного контакту СН...Н з енергією 0,11 ккал/моль у конформері 23 відповідає ван-дер-Ваальсовому контакту.

Серед зафіксованих гетероасоціатів  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  15 (1,3-8,10-13,15,19,21 і 26) мають плоскосиметричну будову; решта 11 (2, 9, 14, 16-18, 20, 22-25) — суттєво непланарні структури. Низка конформерів (2, 9, 16-25) утворені, зокрема, за рахунок участі метильної групи як донора протону Н-зв'язування.

*Пояснення класичного мас-спектрометричного експерименту.* У роботах [17,18] описано мас-спектрометричний експеримент з реєстрації ентальпії зв'язування біомолекул у вакуумі який нині вважається класичним. Зокрема, за температури 383К зареєстровано реакцію  $m^9\text{Gua} + m^1\text{Cyt} \leftrightarrow m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  з ентальпією комплексоутворення  $\Delta H = 87,9$  кДж/моль.

Спираючись на дані заселеності енергетично найвигіднішого асоціата 1, нами проведено розрахунок його ентальпії комплексоутворення  $\Delta H$  з урахуванням так званої BSSE поправки [19,20] при  $T=383\text{K}$ . Отримане теоретичне значення  $\Delta H = 99,97$  кДж/моль збігається із експериментальним з точністю 13,7%.

Похибка, що виникла, пояснюється польові залежності константи асоціації для найімовірніше тим фактом, що під час пари  $m^0\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  через слабку інтенсивність експерименту авторам не вдалось виміряти піка, яка при зменшенні потенціалу на емітері

Таблиця 1

Основні фізико-хімічні властивості Н-зв'язаних гетероасоціатів  $m^0\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$

Ко мпл екс	$\Delta G_0$ , ккал/ моль	$\mu$ , D	Н-зв'язок/ вдВ контакт АН...В / А...В	$\rho$ , а.о.	$\Delta\rho$ , а.о.	100 $\epsilon$	$E_{\text{НВ}}$ , ккал/ моль	$d_{\text{АВ}}$ , Å	$d_{\text{НВ}}$ , Å	$\Delta d_{\text{АН}}$ , Å	$\angle\text{АНВ}$ , град
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)
1	0,00	6,43	N1H...N3	0,031	0,085	6,02	7,85	2,958	1,927	0,020	176,8
			N4H...O6	0,036	0,116	2,74	10,94	2,808	1,774	0,026	178,4
			N2H...O2	0,026	0,096	3,98	6,83	2,928	1,907	0,012	178,0
2	9,70	7,93	C1H...O6	0,012	0,035	1,98	2,02	3,430	2,370	0,001	163,2
			N1H...O2	0,028	0,107	5,52	7,09	2,842	1,881	0,009	155,7
			N2H...O2	0,016	0,061	3,12	3,34	3,012	2,139	0,005	143,1
3	9,73	6,51	N3H...N1	0,036	0,085	5,64	9,73	2,914	1,870	0,033	176,2
			O6H...N4	0,051	0,093	3,94	16,53	2,707	1,705	0,039	172,2
			N2H...O2	0,021	0,083	4,17	5,14	3,008	1,995	0,007	177,0
4	10,93	6,33	N3H...N7	0,042	0,097	5,00	12,75	2,832	1,787	0,032	179,5
			C8H...O2	0,003	0,012	6,88	0,58	3,664	3,021	0,000	118,6
			O6H...N4	0,047	0,095	3,35	14,84	2,703	1,733	0,037	161,0
5	11,41	6,28	N3H...N1	0,034	0,084	5,71	8,76	2,938	1,899	0,030	174,2
			O6H...O2	0,036	0,115	2,05	11,62	2,728	1,750	0,018	170,9
			N2H...N4	0,025	0,079	6,39	5,80	3,029	2,009	0,013	178,0
6	12,32	13,40	N2H...N3	0,033	0,088	6,00	8,78	2,923	1,894	0,021	178,9
			N4H...N3	0,022	0,070	7,42	4,81	3,087	2,063	0,017	177,0
7	12,72	5,79	N3H...N7	0,042	0,097	5,07	12,44	2,835	1,793	0,030	176,9
			C8H...N4	0,004	0,013	3,06	0,70	3,671	3,003	0,000	120,5
			O6H...O2	0,032	0,113	0,97	9,85	2,730	1,782	0,016	160,7
8	13,00	1,80	C8H...N3	0,014	0,047	4,32	2,40	3,192	2,350	0,003	133,4
			N4H...N7	0,026	0,083	5,93	6,43	2,981	1,969	0,018	168,3
9	13,57	4,50	C8...N3	0,009	0,028	15,52	1,50	3,101	-	-	-
			C9H...O2	0,010	0,029	4,11	1,68	3,511	2,452	0,003	162,7
			N4H...N7	0,021	0,066	4,31	3,81	3,077	2,083	0,012	164,0
10	14,05	8,78	N7H...N3	0,052	0,092	5,10	16,72	2,765	1,709	0,046	177,4
			C8H...O2	0,006	0,022	10,45	1,19	3,326	2,715	0,001	115,6
			N4H...O6	0,042	0,127	1,76	14,11	2,736	1,700	0,035	172,0
11	14,76	12,43	N4H...N7	0,014	0,047	4,19	2,42	3,101	2,311	0,003	134,2
			N4H...O6	0,016	0,060	4,70	3,35	3,039	2,140	0,004	147,2
12	15,25	16,21	N4H...O6	0,021	0,083	3,74	4,60	2,991	1,991	0,007	168,9
			C5H...N7	0,008	0,023	5,72	1,19	3,686	2,604	0,001	179,5
13	15,32	15,65	N4H...N7	0,019	0,063	7,62	3,55	3,132	2,130	0,009	168,7
			C5H...O6	0,010	0,034	3,54	1,82	3,458	2,376	0,000	179,4
14	15,33	14,42	N2H...O2	0,025	0,092	1,25	5,83	2,932	1,933	0,012	165,1
15	15,73	14,58	N4H...N7	0,018	0,060	6,98	3,22	3,134	2,162	0,007	160,2
			N4H...O6	0,009	0,033	6,78	1,81	3,102	2,469	0,001	120,2
16	16,04	13,60	C9H...O2	0,013	0,047	1,91	2,65	3,330	2,276	-0,001	162,7
			N3H...N3	0,021	0,067	6,86	4,48	3,104	2,076	0,019	174,6
			N2H...N4	0,032	0,089	5,71	8,46	2,926	1,901	0,021	172,9
17	16,13	14,38	C1H...N3	0,008	0,023	7,17	1,31	3,700	2,632	0,000	165,8
			N2H2...O2	0,025	0,106	3,64	7,00	2,874	1,868	0,010	168,3

(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	(12)
18	16,34	14,08	C1H...N3	0,008	0,024	6,54	1,37	3,675	2,609	0,000	165,6
			N2H...O2	0,026	0,107	3,65	7,15	2,873	1,866	0,011	168,5
19	17,16	15,29	C6H...O6	0,012	0,040	2,29	2,23	3,368	2,310	0,000	164,8
			C6H...N7	0,003	0,010	145,9	0,45	3,882	3,134	0,000	126,9
			C1H...O6	0,006	0,021	31,44	1,12	3,643	2,621	-0,001	156,0
			C5H...N7	0,003	0,009	6,47	0,41	3,938	3,229	0,000	124,1
20	17,35	13,38	N3H...N3	0,020	0,063	6,86	3,95	3,134	2,114	0,017	170,8
			N2H...O2	0,027	0,102	2,94	7,38	2,896	1,882	0,012	171,6
			C9H...N4	0,014	0,045	6,26	2,43	3,407	2,329	0,001	169,1
21	17,41	14,56	C1H...N7	0,008	0,022	4,31	1,21	3,699	2,626	-0,001	168,0
			C6H...O6	0,012	0,040	2,97	2,15	3,343	2,310	0,001	158,6
22	17,85	1,94	C8H...O2	0,015	0,057	5,39	3,00	3,181	2,166	0,000	155,1
			C1H...N7	0,011	0,032	5,59	1,70	3,504	2,432	0,001	165,0
23	18,04	2,75	C1H...H5	0,001	0,004	47,17	0,11	4,154	3,296	0,001	136,3
			N4H...N3	0,021	0,071	2,00	4,36	3,051	2,101	0,013	154,3
			N2H...N4	0,014	0,049	21,42	2,58	3,190	2,284	0,001	148,1
24	18,60	12,55	C9H...N3	0,009	0,028	9,91	1,58	3,525	2,540	-0,001	149,8
			N4H...N3	0,022	0,074	3,73	4,91	3,049	2,058	0,017	162,6
			N2H...N4	0,007	0,025	70,82	1,26	3,459	2,619	0,001	140,6
25	20,85	12,52	N3H...N3	0,022	0,068	6,75	4,76	3,083	2,063	0,022	170,1
			C9H...O2	0,010	0,070	3,22	3,99	3,183	2,108	-0,002	168,2
			N4H...N2	0,038	0,095	5,73	10,97	2,864	1,829	0,031	173,9
26	36,77	9,73	N7H...N3	0,049	0,114	6,68	13,84	2,762	1,746	0,024	168,4
			N4H...C8	0,015	0,037	6,13	2,04	3,317	2,333	0,019	160,1
			O6H...O2	0,023	0,085	2,94	5,26	2,893	1,943	0,017	162,7

\*Примітка.  $\Delta G^0$  - відносна енергія Гіббса ( $T=298,15K$ ;  $P=1\text{атм}$ );  $\mu$  — дипольний момент; АН...В/А...В — атоми, що беруть участь в утворенні Н-зв'язку / ван-дер-ваальсового контакту (рис. 1);  $\rho$  — електронна густина;  $\Delta\rho$  — лапласіан електронної густини;  $\varepsilon$  — еліптичність у критичних точках (3,-1);  $E_{\text{НВ}}$  — енергія Н-зв'язку; відстані  $d_{\text{АВ}}$ ,  $d_{\text{НВ}}$  та кути  $\angle\text{АНВ}$  між центрами Н-зв'язку; подовження  $\Delta d_{\text{АН}}$  групи АН при утворенні Н-зв'язку АН...В.

знижувалась до рівня фону. Таким чином, гетероасоціат  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$ , який спостерігався в експерименті [17, 18] відповідає комплексу 1, котрий є канонічною Вотсон-Криківською парою (табл. 1), яка стабілізується трьома міжмолекулярними Н-зв'язками N1H...N3 (7,85), N4H...O6 (10,94), N2H...O2 (6,83 ккал/моль).

#### Висновки.

Вперше отримано повне сімейство гетероасоціатів  $m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$ , яке складається із 26 структур у діапазоні відносної енергії Гіббса

$0\div 36,77$  ккал/моль. Усі вони стабілізуються класичними (NH...N/O і OH...N/O), слабкими (CH...N/O) Н-зв'язками та двома ван-дер-Ваальсовими контактами (CH...H і C...N).

Доведено, що метильна група, яка моделює цукрофосфатний кістяк ДНК, є донором міжмолекулярних Н-зв'язків. Вперше теоретично пояснено результат класичного мас-спектрометричного експерименту щодо визначення ентальпії реакції комплексоутворення  $m^9\text{Gua} + m^1\text{Cyt} \leftrightarrow m^9\text{Gua}\cdot m^1\text{Cyt}$  у вакуумі.

#### Список використаних джерел

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. / Р. Бейдер. – Москва: Мир, 2001. – 532 с.
2. Weinhold F. Discovering Chemistry With Natural Bond Orbitals / F. Weinhold,
3. Watson J.D. Molecular Structure of Nucleic

#### 4. References

1. BEIDER, R. (2001) Atomy v molekulah. Kvantovaja teorija. MOSKVA: Mir.
2. WEINHOLD, F., LANDIS, C. (2012) Discovering Chemistry With Natural Bond. New Jersey: John Wiley & SONS, Inc.
3. WATSON, J., CRICK, F. (1953) Molecular

- Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid / J.D. Watson, F.H.C. Crick // *Nature*. — 1953. — **171**. — P. 737–738.
4. *Watson J.D.* Genetical Implications of the Structure of DNA / J.D. Watson, F.H.C. Crick // *Nature*. - 1953. - **171**. - P. 964-967.
  5. *Sponer J.E.* Principles of RNA Base Pairing: Structures and Energies of the Trans Watson-Crick/Sugar Edge Base Pairs / J.E. Sponer, N. Spackova, J. Leszczynski, J. Sponer // *J.Phys.Chem. B*. — 2005. — **109**. — P. 11399-11410.
  6. *Sponer J.E.* Non-Watson-Crick Base Pairing in RNA. Quantum Chemical Analysis of the cis Watson-Crick/Sugar Edge Base Pair Family / J.E. Sponer, N. Spackova, P. Kulhanek, J. Leszczynski, J. Sponer // *J.Phys.Chem. A*. — 2005. — **109**. — P. 2292-2301.
  7. *Van Nostrand K.P.* Molecular Mechanics Investigation of an Adenine-Adenine Non-Canonical Pair Conformational Change / K.P. Van Nostrand, S.D. Kennedy, D.H. Turner, D.H. Mathews // *J.Chem.Theory Comput.* — 2011. — **11**. — P. 3779-3792.
  8. *Lemieux S.* RNA canonical and non-canonical base pairing types: a recognition method and complete repertoire / S. Lemieux, F. Major // *Nucleic Acids Research*. — 2002. — **30**. — P. 4250-4263.
  9. *Глушенков А.Н.* Прототропная таутомерия 9-метилгуанина: квантово-механическое исследование / Глушенков А.Н., Говорун Д.Н. // *Доповіді НАН України* - 2014. - №9 — С. 151-156.
  10. *Глушенков А.Н.* Геометрическое построение всех возможных ассоциированных водородными связями пар нуклеотидных оснований / Глушенков А.Н., Говорун Д.Н. // *Доповіді НАН України* - 2014. - №8. — С. 133-137.
  11. *Brandhorst K.* Efficient computation of compliance matrices in redundant internal coordinates from Cartesian Hessians for nonstationary points / K. Brandhorst, J. Grunenberg // *J.Chem.Phys.*, 2010. — **132**. — P. 184101-1–184101-7.
  12. *Brandhorst K.* How strong is it? The interpretation of force and compliance constants as bond strength descriptors. / K. Brandhorst, J. Grunenberg // *Chem.Soc.Rev.*, 2008. — **37**. — P. 1558-1567.
  13. *Iogansen A.V.* Direct proportionality of the hydrogen bonding energy and the Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic ACID. *Nature*. 171. pp. 737–738.
  4. *WATSON, J., CRICK, F.* (1953) Genetical Implications of the Structure of DNA. *Nature*. 171. pp. 964-967.
  5. *SPONER, J.E., SPACKOVA, N., LESZCZYNSKI, J., SPONER, J.* (2005) Principles of RNA Base Pairing: Structures and Energies of the Trans Watson-Crick/Sugar Edge Base Pairs. *J.Phys.Chem. B*. 109. pp. 11399-11410.
  6. *SPONER, J.E., SPACKOVA, N., KULHANEK, P., LESZCZYNSKI, J., SPONER, J.* (2005) Non-Watson-Crick Base Pairing in RNA. Quantum Chemical Analysis of the cis Watson-Crick/Sugar Edge Base Pair Family. *J.Phys.Chem. A*. 109. pp. 2292-2301.
  7. *VAN NOSTRAND, K., KENNEDY S., TURNER, D., MATHEWS, D.* (2011) Molecular Mechanics Investigation of an Adenine-Adenine Non-Canonical Pair Conformational Change. *J.Chem.Theory Comput.* 11. pp. 3779-3792.
  8. *LEMIEUX, S., MAJOR, F.* (2002) RNA canonical and non-canonical base pairing types: a recognition method and complete repertoire. *Nucleic Acids Research*. 30. pp. 4250-4263.
  9. *GLUSHENKOV, A., HOVORUN, D.* (2014) Prototropnaja tautomerija 9-metilguanina: kvantovo-mekhanicheskoe issledovanie. *Dopovidi NAN Ukrainy*. 9. pp. 151-156.
  10. *GLUSHENKOV, A., HOVORUN, D.* (2014) Geometricheskoe postroenie vseh vozmozhnykh assotsiirovannykh H-svjazjami par nukleotidnykh osnov. *Dopovidi NAN Ukrainy*. 8. pp. 133-137.
  11. *BRANDHORST, K., GRUNENBERG, J.* (2010) Efficient computation of compliance matrices in redundant internal coordinates from Cartesian Hessians for nonstationary points. *J.Chem.Phys.* 132. pp. 184101-1–184101-7.
  12. *BRANDHORST, K., GRUNENBERG, J.* (2008) How strong is it? The interpretation of force and compliance constants as bond strength descriptors. *Chem.Soc.Rev.* 37. pp. 1558-1567.
  13. *IOGANSEN, A.* (1999) Direct proportionality of the hydrogen bonding energy and the intensification of the stretching (XH) vibration in infrared spectra. *Spectrochimica Acta Part A*. 55. pp. 1585-1612.
  14. *ESPINOSA, E., MOLINS, E., LECOMTE, C.* (1998) Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed

- intensification of the stretching (XH) vibration in infrared spectra / A.V. Iogansen // *Spectrochimica Acta Part A*. – 1999. – **55**. – PP. 1585-1612.
14. *Espinosa E.* Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities / E. Espinosa, E. Molins, C. Lecomte // *Chem.Phys.Letters*. – 1998. – **285**. – P. 170-173.
  15. *Brovarets' O.O.* Why the tautomerization of the G-C Watson–Crick base pair via the DPT does not cause point mutations during DNA replication? QM and QTAIM comprehensive analysis / O.O. Brovarets', D.M. Hovorun // *J.Biomol.Struct.Dyn.* - 2013. – **32**. – P. 1474-1499
  16. *Brovarets' O.O.* Intermolecular CH...O/N H-bonds in the biologically important pairs of natural nucleobases: a thorough quantum-mechanical study / O.O. Brovarets', Y.P. Yurenko, D.M. Hovorun // *J.Biomol.Struct.Dyn.* – 2013. – **32**. – P. 993-1022.
  17. *Суходуб Л.Ф.* Масс-спектрометрическое изучение взаимодействия азотистых оснований нуклеиновых кислот в вакууме / Л.Ф. Суходуб, И.К. Янсон // *Stud.Biophys.* – 1976. – №59. – С. 209-220.
  18. *Янсон И.К.* Ряд стабильности пар азотистых оснований нуклеиновых кислот. / И.К. Янсон, Л.Ф. Суходуб // *Докл. АН СССР*. – 1975. – №.223. – С. 1010-1013.
  19. *Boys S.F.* Calculation of Small Molecular Interactions by Differences of Separate Total Energies - Some Procedures with Reduced Errors / S.F. Boys, F. Bernardi // *Mol. Phys.* - 1970. - **19**. - P. 553–566.
  20. *Simon S.* How does basis set superposition error change the potential surfaces for hydrogen bonded dimers? / S. Simon, M. Duran, J.J. Dannenberg // *J. Chem. Phys.* - 1996. - **105**. - P. 11024-11031.
  - electron densities. *Chem.Phys.Letters*. 285. pp. 170–173.
  15. *BROVARETS', O., HOVORUN, D.* (2013) Why the tautomerization of the G-C Watson–Crick base pair via the DPT does not cause point mutations during DNA replication? QM and QTAIM comprehensive analysis. *J.Biomol.Struct.Dyn.* 32. pp. 1474-1499.
  16. *BROVARETS', O., YURENKO, Y., HOVORUN, D.* (2013) Intermolecular CH...O/N H-bonds in the biologically important pairs of natural nucleobases: a thorough quantum-mechanical study. *J.Biomol.Struct.Dyn.* 32. pp. 993-1022.
  17. *SUKHODUB, L., YANSON, I.* (1976) Mass-спектрометрическое изучение взаимодействия азотистых оснований нуклеиновых кислот в вакууме. *Stud.biophys.* 59. pp. 209-220
  18. *YANSON, I., SUKHODUB, L.* (1975) Ряд стабильности пар азотистых оснований нуклеиновых кислот. *Dokl. AN SSSR.* 223. pp. 1010-1013.
  19. *BOYS, S., BERNARDI, F.* (1970) Calculation of Small Molecular Interactions by Differences of Separate Total Energies - Some Procedures with Reduced Errors. *Mol. Phys.* 19. pp. 553–566.
  20. *SIMON, S., DURAN, M., DANNENBERG, J.* (1996) How does basis set superposition error change the potential surfaces for hydrogen bonded dimers? *J. Chem. Phys.* 105. pp. 11024-11031.

Надійшла до редколегії 06.06.14