



УДК 577.32

© 2011

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

Конформаційний аналіз низькомолекулярної моделі цукрово-фосфатного кістяка натрієвої ДНК

Вперше квантово-механічним методом на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//DFT V3LYP/6-31G(d,p) проведено повний конформаційний аналіз низькомолекулярної натрієвої сполуки, що моделює електронейтральний цукрово-фосфатний кістяк ДНК. Встановлено, що з усіх 8959 можливих конформерів лише 51 є твірними цукрово-фосфатного кістяка А-подібних форм ДНК. Не виявлено модельних А-подібних форм ДНК з протилежними значеннями всіх торсійних кутів. Зафіксовано 53 твірних конформери цукрово-фосфатного кістяка В-подібних форм ДНК, шість з яких мають ідентичний до природних набір номенклатурних торсійних кутів α , β , γ , δ , ϵ та ζ . Виявлено 426 твірних конформерів цукрово-фосфатного кістяка Р-подібних форм ДНК з цукрами С2'-endo та С3'-endo. Решта 509 сполук мають широкий спектр конформацій цукрів, найчисленнішими серед яких є С1'-exo та С4'-endo. Отримані результати узгоджуються з попередніми дослідженнями модельного біцукрового залишку, в яких фосфатна група нейтралізована протоном, та розширюють існуючі уявлення про конформаційну будову та мінливість макромолекули ДНК.

У роботі теоретично досліджено фізичні причини спіральності натрієвої ДНК сучасними квантово-механічними методами з використанням модельного біцукрово-фосфатного залишку з електронейтральними фосфатними групами. Ця сполука є найпростішою структурною моделлю полімерного кістяка ДНК, який, в свою чергу, слугує надзвичайно важливим об'єктом дослідження у біохімії, біології та молекулярній біофізиці, адже саме рентгенограма волокон натрієвої солі тимусної ДНК у В-формі, отримана Р. Франклін 1952 року [1], стала головним поштовхом до відкриття Дж. Вотсоном і Ф. Криком просторової будови цієї молекули [2]. Крім того, більшість сучасних біофізичних експериментів поза клітиною проводять саме з натрієвою ДНК — її агрегатними станами та конформаціями [3]. Біологічно активні іони, зокрема натрій, стабілізують структуру ДНК, визначають рівновагу між різними її формами, відіграють ключову роль у вищих рівнях її організації. В свою чергу конформаційні властивості самої молекули ДНК здебільшого реалізуються за рахунок

цукрово-фосфатного кістяка. Тому вичерпні фізичні уявлення про конформаційну мінливість останнього відкривають перспективу кращого розуміння просторової будови ДНК, зокрема, походження її спіральності.

Проводячи всебічний аналіз конформаційних можливостей модельного біцукрового залишку, ми продовжуємо започаткований раніше підхід до теоретичного конформаційного аналізу модельних фрагментів ДНК [4–6], значно розширюючи та доповнюючи існуючі дані, та намагаємося відповісти на важливе запитання — які фізичні причини зумовлюють спіральну структуру цієї біологічно надважливої макромолекули.

Літературні дані про конформаційну мінливість ДНК, на жаль, значно обмежені у виборі модельних фрагментів або реалізовані на застарілих теоретичних засадах [7].

Попередні наші дослідження модельного аніонного цукрово-фосфатного кістяка не виявили у його конформаційному спектрі біологічно поширеної *B*-форми ДНК. Зафіксовано лише існування *A*-подібних форм, що мають значно більші кути спірального обертання $9,2\text{--}176,0^\circ$ [5] порівняно з відповідними значеннями, характерними для нативної макромолекули [8]. Аналіз біцукрово-фосфатного кістяка ДНК з нейтралізованою протоном при атомі кисню O2 фосфатною групою показав, що з усієї множини його конформерів лише 107 є твірними цукрово-фосфатного кістяка *A*-подібних форм ДНК з кутами спірального обертання, які лежать в діапазоні $20,3\text{--}176,4^\circ$. В той же час модельних *A*-подібних форм ДНК з усіма нативними значеннями торсійних кутів не виявлено. Проте показано, що існує 11 твірних конформацій однорідного спірального цукрово-фосфатного кістяка *B*-подібної форми ДНК з торсійними кутами, характерними для нативної молекули ДНК, які забезпечують при цьому кути спірального обертання у діапазоні $69,2\text{--}74,3^\circ$ [6].

Об'єкт та методи дослідження. Стартові конформери досліджуваної нами низькомолекулярної моделі натрієвого цукрово-фосфатного кістяка ДНК — електронейтрального натрієвого біцукрового залишку (рис. 1) — отримано із повного конформаційного сімейства 1',2'-дидезоксирибози [4]. Фосфатна група нейтралізована іоном натрію, локалізованим між атомами кисню O1 та O2 у положенні, що описується такими параметрами: $(O3'-P-O2-Na) = -135^\circ$, $(P-O2-Na) = 88^\circ$ і $(O2-Na) = 2,22 \text{ \AA}$ [9]. Крім того, додатково враховано, що джерелом конформаційної мінливості біцукрового залишку є загальмоване обертання навколо кожного з одинарних хімічних зв'язків цукрово-фосфатного кістяка на кут 120° , що відповідає розташуванню номенклатурних торсійних кутів в сусідніх секторах стійких значень.

У згаданій моделі ми намагалися зберегти усі типові зв'язки та складові цукрово-фосфатного кістяка ДНК та найповніше дослідити його конформаційну поведінку, мінімізуючи при цьому розмір модельної системи з метою зменшення необхідного часу розрахунків [10].

Розрахунки без будь-яких структурних обмежень реалізовані на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd) // DFT B3LYP/6-31G(d,p). Дані коливальних спектрів використовували для ідентифікації стійкості отриманих структур та для обчислення їхньої відносної енергії Гіббса при стандартних умовах.

Набір параметрів спіралі макромолекули визначали з використанням довжин зв'язків, валентних та двогранних кутів [11]. У роботі використано стандартні позначення атомів та класичних конформаційних змінних цукрово-фосфатного кістяка ДНК [8].

Квантово-механічні розрахунки проведено з використанням програмного пакету "GAUSSIAN03" для платформи Win32 [12].

Результати та їх обговорення. Встановлено, що модельний натрієвий біцукровий залишок цукрово-фосфатного кістяка ДНК має 8959 стійких конформерів. Виявилось, що

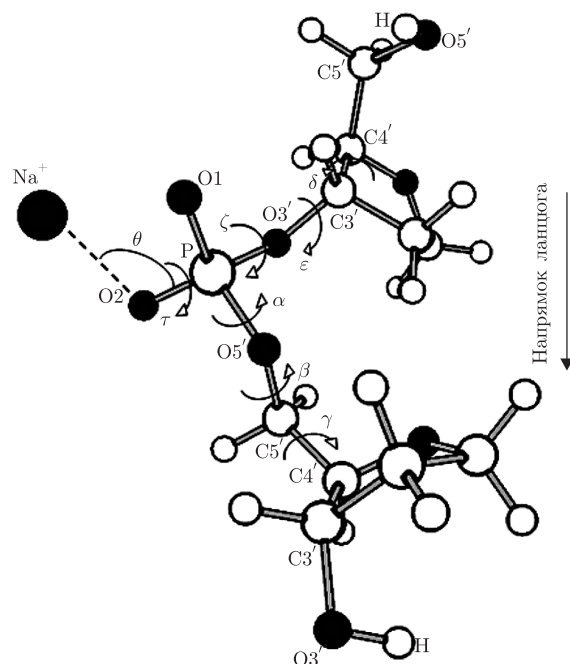


Рис. 1. Просторова будова сполуки, що моделює натрієвий цукрово-фосфатний кістяк ДНК. Позначення конформаційних змінних і атомів кістяка загальноприйняте [8], $\tau \equiv \text{O3}'\text{-P-O2-Na}^+$, $\theta \equiv \text{P-O2-Na}^+$, $d \equiv \text{O2-Na}^+$

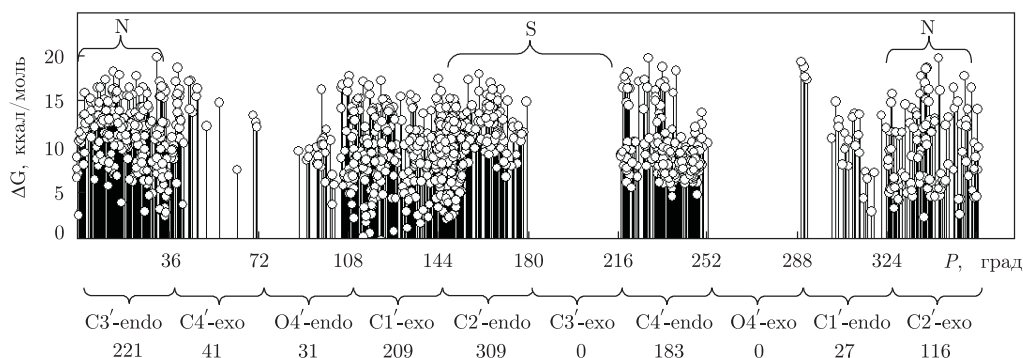


Рис. 2. Кількісний розподіл біцукрових залишків, які моделюють гомогенний натрієвий цукрово-фосфатний кістяк ДНК, за класичними конформаційними підсімействами: N, S-конформери з північними та південними цукрами відповідно

з усієї цієї множини лише 1719 структур мають фуранозне кільце в однаковій конформації і потенційно можуть бути використані для побудови гомогенного цукрово-фосфатного кістяка ДНК. Подальший аналіз показав, що 582 конформери є замкненими структурами, що унеможливує побудову з них однорідних спіралей без стеричних перешкод.

Решта 1137 конформерів мають прийнятний набір двограних кутів α , β , γ , δ , ϵ та ζ , які дозволяють побудувати з них однорідні спіралі. Розподіл конформерів за кутом псевдообертання наведено на рис. 2. Діапазон відносних вільних енергій Гіббса становить 0–19,83 ккал/моль при стандартних умовах. Усі сформовані на їх основі електронейтральні натрієві цукрово-фосфатні спіральні структури є правозакрученими.

Модельні біцукрові залишки гомогенного електронейтрального цукрово-фосфатного кістяка ДНК утворюють два сімейства.

Перше сімейство нараховує 202 структури з прийнятними наборами конформаційних параметрів, що дозволяють отримувати гомогенні спіральні цукрово-фосфатні кістяки ДНК у тому розумінні, що при приєднанні до них основ з відповідними значеннями кута χ утворюються структури з основами, зорієнтованими до осі спіралі. Деякі такі структури з цукрами C2'-endo і C3'-endo наведено в табл. 1. Конформери сімейства мають широкий спектр цукрів (в дужках вказано їх кількість): C1'-endo (19), C1'-exo (17), C2'-endo (S) (53), C2'-exo (N) (44), C3'-endo (N) (51), C4'-endo (13), C4'-exo (1) та O4'-endo (4). Оскільки конформаційні переходи у межах одного з підсімейств (N або S) відбуваються практично без подолання енергетичних бар'єрів [8], то всі 95 модельних конформерів з підсімейства N є твірними електронейтрального цукрово-фосфатного кістяка А-одібних форм ДНК. У межах розглядуваного сімейства виявлено 53 конформери з S-цукрами, що є твірними цукрово-фосфатного кістяка В-подібних форм ДНК, на відміну від модельної сполуки в аніонній формі, де в аналогічному сімействі серед біологічно важливих конформерів виявлено лише конформери з C3'-endo (N) цукрами [5]. В свою чергу отримані результати узгоджуються з попередніми дослідженнями модельного біцукрового залишку, коли фосфатна група нейтралізована протоном [6].

Енергетично найвигіднішим твірним конформерам сімейства з цукровими залишками в конформаціях C3'-endo та C2'-endo відповідають спіралеподібні натрієві цукрово-фосфатні кістяки А- та В-подібних форм ДНК з кутами спірального обертання 169,3 та 76,1° відповідно (рис. 3). Це майже в п'ять разів перевищує величину кута спірального обертання для нативної А-форми та в два рази — для нативної В-форми ДНК [8]. Даний результат вказує на те, що вищезгадані однорідні спіралі є перекрученими і містять запас енергії, за рахунок якої може реалізуватися стійкість подвійної спіралі ДНК. З цього також випливає, що нетрадиційною складовою стекінгових взаємодій ДНК є притискання сусідніх пар основ одна до одної за рахунок напруги у цукрово-фосфатному кістяку. При цьому в обох вищезгаданих випадках двогранні кути, що відповідають перекрученим спіралям, істотно відрізняються.

Так, в енергетично найвигіднішому А-подібному конформері нативним секторам значень, що найчастіше реалізуються в експериментально досліджених зразках ДНК [13], з шести торсійних кутів відповідає лише один $-\delta \in \text{ск}$, решта кутів α , β , γ , ε і ζ знаходяться в секторах $ан$, $ск$, $ск$, $-ак$ і $ак$, відповідно (рис. 3, а). Повна відповідність усіх шести торсійних кутів нативним значенням в модельних конформерах А-подібних форм ДНК з цукрами C3'-endo в межах даного сімейства відсутня. Найбільша відповідність при

Таблиця 1. Основні структурні параметри вибраних конформерів, які є твірними натрієвого цукрово-фосфатного кістяка А- та В-подібних форм ДНК та однорідних спіралей, що їм відповідають. Тут ΔG — вільна енергія Гіббса при нормальних умовах (ккал/моль); кути (град) позначено, як і у [8], $\tau \equiv \text{O3'-P-O2-Na}$

Конформація цукру	Кут спірального обертання	γ	β	α	ζ	ε	δ	τ	P	ν_{\max}	ΔG
C3'-endo	169,3	40,9	82,3	155,0	104,5	-90,3	78,1	148,1	35,5	40,8	0,00
C2'-endo	76,1	49,3	169,2	-70,4	-78,8	-148,8	139,7	121,2	148,2	37,0	4,26
C3'-endo	77,6	51,2	158,3	-64,4	-64,4	-113,5	88,2	119,1	3,2	35,6	8,95
C2'-endo	70,9	-178,7	-167,1	156,8	-79,2	-157,4	138,0	119,6	150,2	38,1	11,06
C3'-endo	44,5	-168,2	-161,1	65,9	73,3	86,6	74,3	126,7	9,3	38,9	13,47

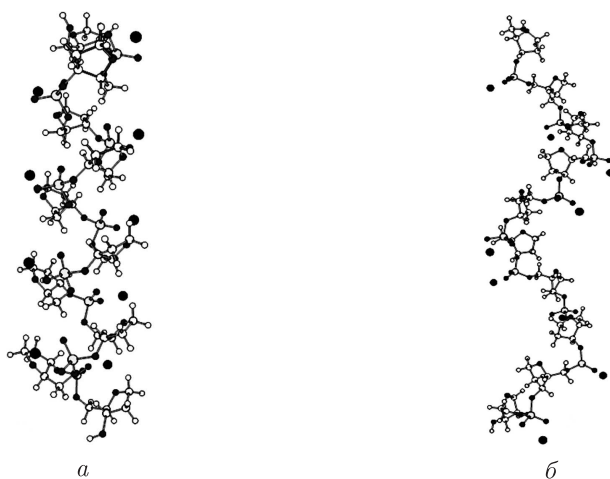


Рис. 3. Модельний натрієвий цукрово-фосфатний кістяк *A*-подібної форми ДНК, твірною якого є енергетично найвигідніший конформер біцукрово-фосфатного залишку (*a*), аналогічний *B*-подібний кістяк ДНК (*б*)

цьому спостерігається для конформера з відносною енергією 8,95 ккал/моль та значенням кута спірального обертання $77,6^\circ$ (див. табл. 1), у якому відмінність від експериментально спостережуваних параметрів реалізується лише для кута $\varepsilon \in -ak$.

Повну відповідність усіх номенклатурних торсійних кутів виявлено лише для шести з 53 електронейтральних спіралеподібних натрієвих цукрово-фосфатних конформерів *B*-подібних форм ДНК з *C2'*-endo цукрами, побудованих на модельних твірних сімейства. Так, спіральні кути цих *B*-подібних спіральних кістяків лежать у межах від $72,6$ до $76,1^\circ$, а діапазон їхніх відносних енергій Гіббса становить (0–3,90) ккал/моль. Енергетично найвигіднішою модельною структурою, як у даній групі з шести конформерів, так і загалом серед усіх *B*-подібних конформерів сімейства, є конформер з кутом спірального обертання $76,1^\circ$ (рис. 3, б).

Решта 50 конформерів *A*-подібної форми ДНК є твірними натрієвих спіральних цукрово-фосфатних кістяків, значення кутів спірального обертання яких знаходяться в межах від $21,8$ до $178,6^\circ$ і порівняно з нативною ДНК такі спіралі також є здебільшого перекрученими. В *A*-подібній спіральній структурі з кутом спірального обертання $44,6^\circ$, що відповідає найменш енергетично вигідному твірному конформеру, природним значенням торсійних кутів нативної ДНК [13] відповідає лише кут $\delta \in ck$. Решта кутів набувають таких значень: γ і $\beta \in -an$, α , ζ і $\varepsilon \in ck$ областям.

Відповідний діапазон кутів спірального обертання для 52 *B*-подібних форм цукрово-фосфатного кістяка ДНК без найбільш енергетично вигіднішого конформера має межі від $48,5$ до $156,3^\circ$. У найменш енергетично вигідному *B*-подібному конформері сімейства природним значенням торсійних кутів відповідають чотири з них: β , $\varepsilon \in -an$, $\zeta \in -ck$ і $\delta \in ck$. Кути $\gamma \in -an$ і $\alpha \in an$, в свою чергу, реалізують кут спірального обертання $70,9^\circ$. Усі твірні конформери першого сімейства при стандартних умовах знаходяться у діапазоні відносних енергій Гіббса (0–17,25) ккал/моль.

Друге сімейство конформерів — твірні гомогенних спіралей, основи в яких зорієнтовані від осі спіралі, налічує 935 конформерів. Всі вони є твірними спіралеподібних електронейтральних цукрово-фосфатних кістяків *P*-подібних форм ДНК [14]. Серед них 256 модельних сполук мають цукри в конформаціях *C2'*-endo (S), що характерно для *B*-форм, і 170 — з конформацією *C3'*-endo (N), характерною для *A*-форм ДНК. Основні параметри енерге-

точно невігідних та найбільш вигідних конформерів з C2'-endo (S) і C3'-endo (N) цукрами наведено в табл. 2.

Решта структур, а саме 509 конформерів другого сімейства, мають цукри в таких конформаціях (в дужках наводиться їх кількість): C1'-exo (192), O4'-endo (27), C1'-endo (8) та C4'-exo (40), а також 72 конформери з цукрами C2'-exo, що відносяться до N-сімейства (A-подібної форми ДНК). Крім того, присутні 170 модельних сполук з C4'-endo цукрами, що рідко зустрічаються в природні ДНК. Кут спірального обертання, який відповідає цим твірним конформерам, лежить у діапазоні (16,2–180,0)°. Твірних конформацій з енергетично невігідним шляхом переходу від S до N через цукри O4'-exo не виявлено.

Енергетично найвигіднішому твірному конформеру з другого сімейства, який продукує електронейтральний цукрово-фосфатний кістяк P-подібної форми ДНК з C2'-endo цукром, відповідає кут спірального обертання 136,2° (рис. 4, а). При цьому торсійні кути, які визначають параметри спіралі — γ , ϵ і δ , — лежать у межах природних областей sk , $-ak$ і ak ; інші три, що реалізують P-подібний стан, розміщені у такий спосіб: $\alpha \in an$, $\zeta \in -sk$ і $\beta \in sk$.

Спіраль, яка відповідає P-формі ДНК і побудована на основі енергетично найбільш невігідного конформера модельного електронейтрального цукрово-фосфатного залишку з C2'-endo цукром, має кут спірального обертання 153,3° та торсійні кути β і δ , значення яких подібні до відповідних кутів у полінуклеотидах, а також кути γ і $\alpha \in -an$, $\epsilon \in -sn$ та $\zeta \in sk$, які реалізують її перекручений стан.

Найбільш та найменш енергетично вигідні модельні конформери — твірні електронейтральних цукрово-фосфатних кістяків P-подібних форм ДНК з C3'-endo цукрами — мають кути спірального обертання 163,1 та 119,5°, відповідно. В енергетично невігідному конформері кути δ і β відповідають його природному значенню в полінуклеотидах. В найбільш вигідній модельній сполуці теж два з них — $\zeta \in -sk$ і $\delta \in sk$ є прийнятними, решта реалізує значне перекручення (рис. 4, б).

Таким чином, на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) проведено вичерпний конформаційний аналіз низькомолекулярної сполуки, що моделює цукрово-фосфатний кістяк ДНК, фосфатні групи якого нейтралізовані іонами натрію. Встановлено, що з усіх 8959 його конформерів лише 51 є твірними цукрово-фосфатного кістяка A-подібних форм ДНК з кутами спірального обертання, які лежать в діапазоні 21,8–178,6°. Модельних A-подібних форм ДНК, що мають нативні значення усіх торсійних кутів, не виявлено. Показано, що існує шість твірних конформацій однорідного спірального цукрово-фосфатного кістяка B-подібної форми ДНК з торсійними кутами, характерними для нативної молекули ДНК, які забезпечують кути спірального обертання у діапазоні 72,6–76,1°. Виявлено також 426 конформерів з C2'-endo та C3'-endo цукрами, які є твірними спіральних цукрово-фосфатних кістяків P-подібних форм ДНК.

Таблиця 2. Основні структурні параметри енергетично найвигідніших та енергетично невігідних конформерів, які є твірними спіральних натрієвих цукрово-фосфатних кістяків P-подібних форм ДНК та спіралей, що їм відповідають з C2'-endo та C3'-endo цукрами (позначення ті ж самі, що й у табл. 1)

Конформація цукру	Кут спірального обертання	γ	β	α	ζ	ϵ	δ	τ	P	ν_{\max}	ΔG
C2'-endo	136,2	48,6	88,9	148,9	-73,6	-148,5	140,3	148,2	147,5	37,4	0,00
C3'-endo	163,1	38,8	81,2	155,6	-72,3	-108,1	79,0	146,5	35,1	39,8	0,30
C2'-endo	153,3	-176,9	150,4	-149,8	66,5	-2,9	141,2	123,3	160,8	35,5	15,71
C3'-endo	119,5	177,8	166,4	-159,5	65,4	49,0	68,0	123,7	32,0	42,0	17,61

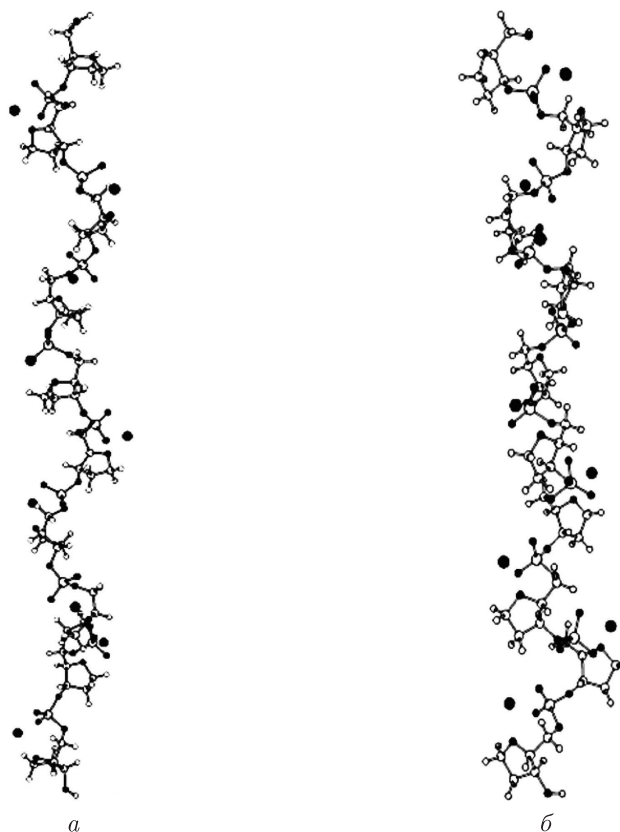


Рис. 4. Спіраль цукрово-фосфатного кістяка натрієвої *P*-подібної форми ДНК, твірною якої є енергетично найвигідніший конформер другого сімейства з *C2'*-endo цукром (*a*) та аналогічна спіраль з *C3'*-endo цукром (*б*)

Решта модельних сполук мають широкий конформаційний спектр цукрів, найчисленнішими з яких є підсімейства *C1'*-exo і *C4'*-endo. Отримані результати, на нашу думку, розширюють існуючі уявлення про конформаційну будову та мінливість макромолекули ДНК.

1. Franklin R. E., Gosling R. G. Molecular Configuration in Sodium Thymonucleate // Nature. – 1953. – **171**. – P. 740–741.
2. Watson J. D., Crick F. A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid // Ibid. – 1953. – **171**. – P. 737–738.
3. Благой Ю. П., Галкин В. Л., Гладченко Г. О. и др. Металлокомплексы нуклеиновых кислот в растворах. – Киев: Наук. думка, 1991. – 272 с.
4. 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.
5. Войтешенко І. С., Жураківський Р. О., Булавін Л. А., Говорун Д. М. Конформаційний аналіз низькомолекулярної моделі аніонного цукрово-фосфатного ланцюга ДНК // Там само. – 2010. – № 11. – С. 158–166.
6. Войтешенко І. С., Жураківський Р. О., Булавін Л. А., Говорун Д. М. Повний конформаційний аналіз низькомолекулярної електронейтральної моделі цукрово-фосфатного ланцюга ДНК // Там само. – 2011. – № 6. – С. 188–196.
7. Marqunick D. S., Schaefer H. F. Theoretical studies of metal-phosphate interactions: interaction of Li⁺, Na⁺, K⁺, Be⁺⁺, Mg⁺⁺, and Ca⁺⁺ with H₂PO₄⁻ and (CH₃O)₂PO₂⁻: implications for nucleic acid salvation // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1975. – **72**. – P. 3794–3798.
8. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – Москва: Мир, 1987. – 584 с.

9. Florian J., Baumruk V., Strajbl M., Bednarova L., Stepanek J. IR and Raman Spectra, Conformational Flexibility, and Scaled Quantum Mechanical Force Fields of Sodium Dimethyl Phosphate and Dimethyl Phosphate Anion // J. Phys. Chem. – 1996. – **5**. – P. 1559–1568.
10. Foresman J. B., Frisch A. Exploring chemistry with electronic structure. – Wallingford, CT: Gaussian Inc., 1996. – 354 p.
11. 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.
12. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Montgomery Jr. J. A., 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 03, Revision C. 02. – Wallingford, CT: Gaussian Inc., 2004.
13. Schneide B., Neidle St., Berman H. M. Conformations of the Sugar-Phosphate Backbone in Helical DNA Crystal Structures // Biopolymers. – 1997. – **42**. – P. 113–124.
14. Pauling L., Corey R. B. A Proposed Structure For The Nucleic Acids // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 1953. – **39**. – P. 84–97.

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 22.10.2010

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**

Conformational analysis of a low-molecular model of sugar-phosphatic DNA sodium chain

The complete conformational analysis of a low-molecular sodium compound which simulates the electroneutral sugar-phosphatic frame of DNA by a quantum-mechanical method at MP2/6-311++G(2df,pd)// DFT B3LYP/6-31G(d,p) level of theory is first performed. It is shown that only 51 from all 8959 possible conformers are formative for sugar-phosphatic frame of A-like DNA forms, among which there are no modeled A-like DNA forms with native values of all torsion angles. 53 formative conformers of sugar-phosphatic frame of B-like DNA forms are detected, 6 of them having a set of nomenclatural torsion angles α , β , γ , δ , ε , and ζ which are identical to natural ones. 426 formative conformers of sugar-phosphatic frame of P-like DNA forms with C2'-endo and C3'-endo sugars are determined. Other 509 compounds have a wide spectrum of sugar's conformations, the most numerous ones are C1'-exo and C4'-endo. The obtained results are in good agreement with our previous investigation of a modeled bisugar residue with proton neutralized phosphate group. In our opinion, these results broaden the conception of the structure and the conformational changeability of a DNA macromolecule.