

УДК 543.42+547.82

**РАСЧЕТ И АНАЛИЗ ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ ТИМИНА И 5-ХЛОРУРАЦИЛА В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ С РАЗНЫМИ рН**© 2009 Г.Н. Тен<sup>1\*</sup>, В.И. Баранов<sup>2</sup><sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского<sup>2</sup>Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва

Статья поступила 14 мая 2008

Рассчитано время жизни цвиттер-ионных, нейтральных оксо- и гидрокситаутомерных форм тимина и 5-хлорурацила с учетом межмолекулярного переноса протона в димерах. Проведена интерпретация временных характеристик пикосекундных спектров для водных растворов с разными значениями рН.

**Ключевые слова:** тимин, 5-хлорурацил, таутомеры, время жизни, расчет.

**ВВЕДЕНИЕ**

Временная (пико- и фемтосекундная) спектроскопия находит широкое применение в одном из специальных разделов химии — химической динамике для исследования переходных состояний химических реакций, в том числе фотодиссоциации, изомеризации, элиминирования, бимолекулярных реакций, реакций Дильса—Альдера, реакций с переносом заряда, внутримолекулярного и межмолекулярного переноса протона (кислотно-основные реакции), а также реакций таутомеризации [1—5]. Одно из основных направлений химической динамики связано с определением структуры переходных состояний, причем не только в газовой фазе, но и в растворах, и на межфазных границах.

Надо отметить, что анализ временных спектров оснований нуклеиновых кислот (ОНК) в водном растворе при различных рН [6, 7] достаточно сложен, так как должен учитывать возможность образования различных молекулярных структур, формирование которых, в свою очередь, зависит от кислотно-основных свойств как растворителя, так и самого основания. В то же время рН среды во многом предопределяет структурные изменения, связанные с переносом протона, что значительно упрощает решение данной задачи.

Цель данной работы состоит в расчете времени жизни молекулярных структур, образующихся при таутомерных превращениях 5-замещенных урацила по межмолекулярному механизму переноса протона и их интерпретации для водных растворов с разным значением рН.

**МЕТОД РАСЧЕТА ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ**

Анализ экспериментальных пикосекундных спектров поглощения и флуоресценции тимина (Thy) и 5-хлорурацила (5Cl-Ura) [6, 7] показывает, что можно выделить три временных интервала, которые интерпретируются авторами эксперимента следующим образом:  $t_1 \sim 0,03 \div 0,2$  нс характеризует время жизни анионов ОНК;  $t_2 \sim 0,5 \div 0,8$  нс соответствует времени жизни таутомеров нейтральных оксоформ; время жизни нейтральных оксо-гидрокситаутомерных форм и катионов ОНК совпадает и лежит в интервале  $t_3 \sim 3,2 \div 4,5$  нс (табл. 1). При этом каждой области рН водного раствора соответствуют определенные временные характеристики, и здесь имеются существенные отличия для Thy и 5Cl-Ura.

---

\* E-mail: TenG@info.sgu.ru

Т а б л и ц а 1

Экспериментальные [ 6, 7 ] значения времени жизни ( $t_1, t_2, t_3$ , нс) разных молекулярных образований Thy и 5Cl-Ura в водных растворах для разных pH и разных длин волн возбуждения ( $\lambda$ , нм)\*

pH	$\lambda$	$t_1$	$t_2$	$t_3$	pH	$\lambda$	$t_1$	$t_2$	$t_3$
Thy [6]					5Cl-Ura [7]				
1	380		0,62±0,01	4,33±0,01	4	360		0,67±0,01	3,19±0,02
	420		0,70±0,01	4,18±0,01		400		0,73±0,06	3,90±0,21
2	380		0,82±0,01	4,07±0,02	7	360	0,18±0,01	0,60±0,09	3,33±0,22
	420		0,86±0,06	4,47±0,31		400	0,13±0,01	0,52±0,07	3,74±0,14
5	380		0,75±0,01	3,91±0,02	10	360	0,23±0,01		3,07±0,13
	420		0,60±0,06	4,16±0,15		400	0,20±0,01		3,43±0,06
7	380		0,70±0,02	3,76±0,05					
	420		0,82±0,02	3,85±0,02					
9	380	0,08±0,0003	0,60±0,01	3,87±0,03					
	420	0,03±0,0015	0,69±0,13	3,89±0,10					

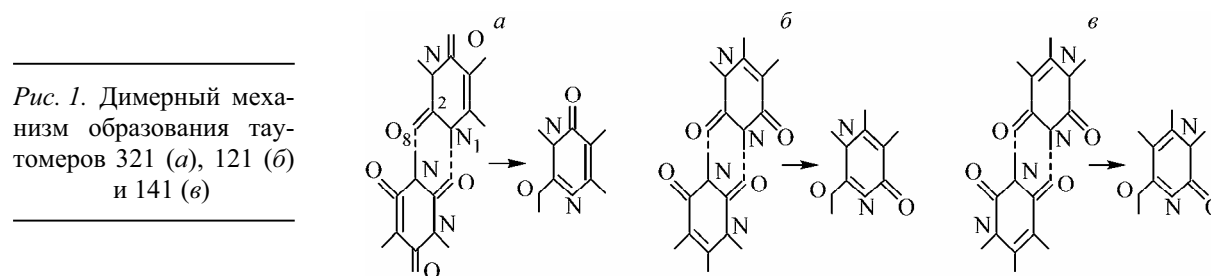
\* Интерпретацию временных интервалов  $t_1, t_2, t_3$  см. в тексте.

Известно, что в воде очень велик эффект гидратации, т.е. образования водородных связей между водой и растворенными веществами, поэтому в водных растворах гомоассоциаты ОНК образуют главным образом вертикальные "стопки" [ 8, 9 ]. Кроме того, как показано методом ЯМР, в водных растворах ассоциаты оснований могут формироваться и посредством образования "горизонтальных" водородных связей [ 10 ]. Так как пикосекундные спектры флуоресценции были изучены в буферных растворах, где одновременно с образованием анионов образуются гидрокситаутомерные формы Thy и 5Cl-Ura [ 6, 7 ], то для расчета времени жизни молекулярных структур наиболее целесообразно воспользоваться моделью межмолекулярного переноса протона, считая, что таутомерное превращение совершается посредством туннельного эффекта. Поскольку в конденсированных средах при самоассоциации ОНК наиболее характерно образование циклических димеров [ 8 ], то будем рассматривать межмолекулярный перенос протона в димерах. В качестве примера на рис. 1 приведен межмолекулярный механизм переноса протона в димерах Ura с образованием таутомеров 321, 121 и 141. При этом возможен либо синхронный перенос двух протонов с образованием нейтральных таутомерных форм (рис. 2, а, в, д), либо последовательный перенос протона сначала вдоль одной, а затем вдоль другой водородной связи с образованием цвиттер-ионных форм (см. рис. 2, б, з).

Согласно Левдину [ 11 ], константу скорости для туннельной структурной перегруппировки можно рассчитать по формуле

$$k = \nu \cdot \exp \left[ \frac{-\pi^2 \cdot a \cdot f}{h} \sqrt{2m \cdot U_0} \right], \quad (1)$$

где  $k$  и  $\nu$  — обратное время и частота прохождения частицы массой  $m$  через потенциальный барьер высотой  $U_0$  и шириной  $a$ . Величина  $f$  показывает, какую часть от потенциального барьера  $U_0$  составляет энергия частицы  $E$  (в данном случае энергия атома водорода): если  $f=1$ , то



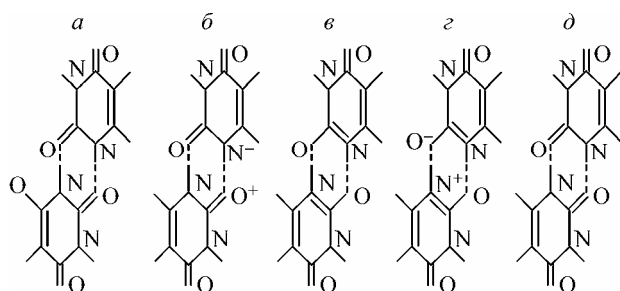


Рис. 2. Межмолекулярный механизм переноса протона в димерах Ura с одновременным ( $a \rightarrow \epsilon \rightarrow d$ ) и последовательным переносом протонов ( $b \rightarrow z$ )

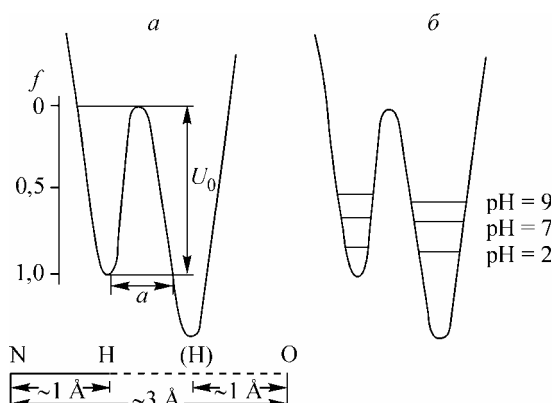


Рис. 3. Схемы туннельного перехода с несимметричными потенциалами исходной и конечной таутомерных форм ( $a$ ) и расположения энергетических уровней протона водородных связей N—H...O и O—H...N для фрагментов H—N—C=O и N=C—O—H лактамной и лактимной форм в зависимости от pH ( $b$ )

$E = 0$ , и, напротив, если  $f = 0$ , то значение  $E$  соответствует величине потенциального барьера  $U_0$  (рис. 3).

При оценке времени жизни по формуле (1) были использованы экспериментальные значения частот, взятые из колебательных спектров 5-замещенных Ura [12, 13], а также результаты расчета фемтосекундных спектров, выполненные ранее для азотсодержащей гетероциклической молекулы 7-азаиндола [14].

Известно, что для разрыва химической связи сначала надо ее "раскачать", т.е. возбудить определенное колебание. При этом для медленных реакций сначала возбуждается одно колебание, затем возбуждение постепенно передается другому колебанию и, наконец, происходит разрыв связи. Для быстрых реакций, к которым принадлежит прототропная таутомерия, возбуждается колебание именно той связи, которая впоследствии и разрывается. В этом случае частота  $\nu$  характеризует координату реакции и соответствует частоте того колебания, которое подлежит разрыву, т.е. в данном случае частоте валентных колебаний связей NH, OH или O...H и N...H.

Как показывает анализ ИК спектров конденсированных состояний 5-замещенных Ura и его таутомеров [12, 13], частоты валентных колебаний  $\nu(\text{OH})$  и  $\nu(\text{NH})$  равны 3250 и 3130  $\text{cm}^{-1}$ , а частоты колебаний водородных связей  $\nu(\text{O}\dots\text{H})$  и  $\nu(\text{N}\dots\text{H})$  — 128 и 120  $\text{cm}^{-1}$  соответственно.

Будем считать, что ширина энергетического барьера  $a$  димеров 5-замещенных урацила на дне потенциальной ямы ( $f = 1,0$ ) соответствует ширине для изолированного димера 7-азаиндола, вычисленной из фемтосекундных спектров и равной 0,54 Å [14]. Такая оценка  $a$  соответствует типичным значениям расстояний N—H и N—H...O водородно-связанных пар молекулярных образований (см. рис. 3) [8, 15].

При определении  $U_0$  потенциального барьера будем рассматривать только те структурные фрагменты молекул, в которых происходит перенос протона, сопровождающийся разрывом старых и образованием новых связей. Например, при образовании таутомера 321 из Ura — фрагменты (H—N<sub>1</sub>=C<sub>2</sub>—O<sub>8</sub>) и (N<sub>1</sub>=C<sub>2</sub>—O<sub>8</sub>—H), при образовании таутомеров 121 из Ura — фрагменты (H—N<sub>3</sub>=C<sub>2</sub>—O<sub>8</sub>) и (N<sub>3</sub>=C<sub>2</sub>—O<sub>8</sub>—H), соответствующие исходному (Ura) и конечному (321, 121) продуктам реакции при переносе протона (см. рис. 1,  $a, b$ ). Такой подход ранее был использован для определения таутомерного состава ОНК с учетом внутри- и межмолекулярного механизма переноса протона [16]. Расчет параметров таутомерного равновесия, проведенный для лактам-лактимной, тион-тиольной и аминок-иминной таутомерии, показал адекватность вычисленного и экспериментально определенного таутомерного состава ОНК. Это

позволило в дальнейшем использовать предложенный полуэмпирический метод для моделирования и расчета относительных констант кислотности и основности ОНК и их таутомерных форм [17]. Как и при определении параметров таутомерного равновесия, вычисленные величины зависимости кислотных и основных свойств ОНК от температуры и pH соответствуют экспериментальным значениям констант. Корректность полученных результатов [16, 17] позволяет использовать такой подход и провести модельный расчет величины потенциального барьера по формуле

$$U_0 = E^A - E^B = \left( \sum_{i \in A} \alpha_i \right)^{-1} - \left( \sum_{i \in B} \alpha_j \right)^{-1}, \quad (2)$$

где энергии  $E^A$  и  $E^B$  структурных фрагментов таутомеров А и В определяются через величины  $\alpha_i = b_i/E_i$ , характеризующие устойчивость связей;  $b_i$  и  $E_i$  — индекс и энергия  $i$ -й связи; суммирование проводится только по связям  $i$  и  $j$  таутомеров А и В, образующих структурный фрагмент, в котором происходит перенос протона. Под индексом  $i$ -й связи (между атомами Y и Z) понимается величина  $b_i = \sum_{\mu \in Y} \sum_{\nu \in Z} P_{\mu\nu}^2$ , где  $P_{\mu\nu}$  — элементы матрицы плотности. Они инвари-

антны при поворотах систем координат, характеризуют прочность химической связи и вычисляются квантово-химическими методами. Для связи X—H с "мигрирующим" при таутомерном превращении протоном учитывается электроотрицательность атома X:  $\alpha_{X-H} = X_X b_{X-H} / E_{X-H}$ .

#### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Величина потенциального барьера  $U_0$ , рассчитанная по формуле (2) с учетом электроотрицательности атома X связи X—H, для лактам-лактимных таутомерных переходов Thy→141, Thy→321, Thy→121 составляет 10,94, 10,58 и 10,55 ккал/моль, а для лактим-лактаминных переходов 141→Thy, 321→Thy, 121→Thy — 11,32, 11,22, 11,13 ккал/моль соответственно (значения электроотрицательности принимали равными  $X_O = 3,5$ ,  $X_N = 3,07$  [18]). Аналогичные расчеты для лактам-лактимных переходов 5Cl-Ura→141, 5Cl-Ura→321, 5Cl-Ura→121 дают значение потенциального барьера, равного 10,89, 10,89 и 11,13 ккал/моль, а для лактим-лактаминных — 12,58, 13,01 и 12,74 ккал/моль.

Расчеты потенциальных функций водородных связей N—H...O и N—H...N, выполненные ранее [19] полуэмпирическим методом с учетом только тех атомов, которые участвуют в образовании водородной связи, характеризуются величиной потенциального барьера 19,4 и 7,7 ккал/моль. Принимая во внимание распределение электронов в остальной части молекулы, значение потенциального барьера для водородной связи N—H...N возрастает и составляет 15,7 ккал/моль [20].

Изменение pH среды может приводить не только к образованию анионов и катионов Thy и 5Cl-Ura, но и доминированию одного из возможных способов межмолекулярного переноса протона — либо одновременно вдоль обеих водородных связей (см. рис. 2, а, в, д), либо последовательно с образованием цвиттер-ионных форм (см. рис. 2, б, з).

Варьируя значения коэффициента  $f$  в формуле (1), показывающего относительное расположение колебательно-возбужденного состояния протона водородной связи в потенциальной яме (см. рис. 3), т.е. энергию  $E$ , можно определить время жизни  $t$  для фиксированных значений частот  $\nu$ , соответствующих колебаниям химических связей  $\nu(\text{NH})$ ,  $\nu(\text{OH})$ ,  $\nu(\text{N}\dots\text{H})$  и  $\nu(\text{O}\dots\text{H})$ . Сравнение вычисленных значений  $t$  и экспериментальных позволяет определить молекулярную структуру, которая образуется в результате разрыва или образования той или иной химической связи, а также характер переноса протонов в димере.

Как показали результаты расчета (табл. 2), для Thy существуют только пять значений  $f$  (или энергетических уровней  $E$ ), при которых вычисленное время жизни соответствует экспериментальным значениям. При этом для каждого подбарьерного таутомерного превращения, например, Ura↔321, наблюдается туннельное расщепление колебательных уровней, что связано с разными значениями  $U_0$  потенциального барьера для лактам-лактимных и лактим-лактаминных таутомерных превращений.

Рассчитанные значения времени жизни  $t$  (нс), коэффициента  $f$  и энергии  $E$  (ккал/моль) разных структурных образований для межмолекулярного механизма переноса протона

Таутомер	$f$	$E$	$t$				$f$	$E$	$t$			
			$\nu(\text{NH})$	$\nu(\text{N}\dots\text{H})$	$\nu(\text{O}\dots\text{H})$	$\nu(\text{OH})$			$\nu(\text{N}\dots\text{H})$	$\nu(\text{O}\dots\text{H})$	$\nu(\text{OH})$	$\nu(\text{NH})$
Thy			Лактам-лактимный переход									
141	0,60	4,48	0,03	0,66			0,59	5,29			0,70	0,06
321			0,03	0,58							0,58	0,03
121			0,03	0,58							0,69	0,04
141	0,69	3,32			0,69		0,67	4,10	3,02			
321					0,60				4,35			
121					0,60				4,11			
141	0,79	2,25			4,28		0,75	3,11	3,92			
321					3,72				4,12			
121					3,72				3,86			
141	0,86	1,49	0,66			0,58	0,81	2,36			0,64	0,73
321			0,76			0,66					0,69	0,78
121			0,76			0,66					0,64	0,73
141	0,97	0,32	4,78			4,18	0,94	0,75			3,93	4,49
321			4,52			3,96					4,08	4,55
121			4,52			3,96					3,78	4,32
5Cl-Ura			Лактим-лактимный переход									
141	0,74	2,77	0,17	3,97			0,73	3,32			3,76	0,30
321			0,17	3,97							3,12	0,25
121			0,19	4,42							4,17	0,34
141	0,85	1,56	0,64			0,56	0,80	2,06			0,62	0,63
321			0,64			0,56					0,75	0,78
121			0,52			0,45					0,68	0,71
141	0,96	0,44	3,92			3,43	0,93	0,89			3,65	4,17
321			3,92			3,43					3,80	3,34
121			3,23			2,83					3,96	4,52

Первый энергетический уровень, который является туннельным, связан с образованием цвиттер-ионных оксо- ( $f=0,60$ ) и гидрокси- ( $f=0,59$ ) таутомерных форм Thy, для которых ордината реакции соответствует разрыву связей с валентными колебаниями  $\nu(\text{NH})$ ,  $\nu(\text{N}\dots\text{H})$  и  $\nu(\text{O}\dots\text{H})$ ,  $\nu(\text{OH})$  соответственно. Данный энергетический уровень туннелирования отвечает прохождению протона потенциального барьера в слабощелочной среде (рН 9). Вычисленное время жизни ( $0,03\div 0,06$  нс и  $0,58\div 0,70$  нс) соответствует молекулярным структурам, образующимся при межмолекулярном переносе протона вдоль одной из водородных связей димера:  $\text{N}-\text{H}\dots\text{O}$  (для лактам-лактимных переходов) или  $\text{O}-\text{H}\dots\text{N}$  (для лактим-лактимных переходов). Перенос протона происходит в два этапа: на первом шаге в димере разрывается связь  $\text{NH}$  с одновременным образованием водородной связи  $\text{N}\dots\text{H}$ , на втором — водородная связь  $\text{O}\dots\text{H}$  становится валентной связью  $\text{OH}$  (см. рис. 2, б, з). Кроме того, полученное время жизни соответствует и анионным структурам Thy.

Второй ( $f=0,69, 0,67$ ) и третий ( $f=0,79, 0,75$ ) энергетические уровни туннелирования протона для лактам-лактимных и лактим-лактимных изомер-изомерных превращений отвечают образованию нейтральных гидрокси- и оксоттаутомерных форм Thy. Это происходит при одновременном переносе протонов вдоль водородных связей димера. В этом случае при определе-

нии времени жизни были использованы частоты валентных колебаний связей NH (см. рис. 2, а) и OH (см. рис. 2, в). Вычисленное время жизни лежит в интервалах  $0,60 \div 0,69$  и  $3,02 \div 4,35$  нс для разных таутомеров и переходов и характеризует одновременный перенос двух протонов вдоль водородных связей димеров лактамной и лактимной форм. Образование нейтральных таутомерных форм происходит в области pH  $7 \div 5$ .

Четвертый ( $f = 0,86, 0,81$ ) и пятый ( $f = 0,97, 0,94$ ) энергетические туннельные уровни соответствуют сильнокислой среде (pH  $2 \div 1$ ) и отвечают образованию катионов оксо- и гидрокситаутомерных форм Thy с временем жизни от  $\sim 0,6$  до  $\sim 4,5$  нс, т.е. увеличение кислотности среды приводит к растяжению димера вдоль межмолекулярной водородной связи, разрыву водородных связей и образованию катионных форм таутомеров Thy.

Для 5Cl-Ura, как показывают результаты расчетов, существуют три значения  $f$ , при которых рассчитанное время жизни соответствует экспериментальным величинам. Первый энергетический уровень, как и для Thy, связан с образованием цвиттер-ионных форм, однако уровень  $E$  ( $f = 0,74, 0,73$ ) расположен значительно ниже, чем для Thy, что можно объяснить разными кислотно-основными свойствами таутомеров Thy и 5Cl-Ura [1]. Соответственно увеличивается время жизни цвиттер-ионных форм и анионов ( $t \approx 0,17 \div 0,34$  для оксо-форм и  $t \approx 3,12 \div 4,42$  для гидрокситаутомер-форм). Пошаговый перенос протонов в димерах 5Cl-Ura наблюдается в слабощелочной среде (pH 10). Второй энергетический уровень ( $f = 0,85, 0,80$ ) отвечает образованию нейтральных таутомерных форм при одновременном переносе протонов в димере вдоль обеих водородных связей. Данный процесс наблюдается при pH 7. Третий энергетический уровень ( $f = 0,96, 0,93$ ) соответствует образованию катионов оксо- и гидрокситаутомеров 5Cl-Ura либо при разрыве димера в сильнокислотной среде, либо при присоединении протона к нейтральным мономерным молекулам 5Cl-Ura.

Энергетические расстояния между колебательными уровнями, для которых наблюдаются подбарьерные переходы, для лактам-лактимных и лактим-лактимных таутомерных превращений Thy составляют 1,16, 1,07, 0,76, 1,17 и 1,17, 1,09, 0,78, 1,50 ккал/моль соответственно. Аналогичные величины для 5Cl-Ura равны 1,21, 1,12 и 1,26, 1,17 ккал/моль. Величина туннельного расщепления колебательных уровней уменьшается при переходе от щелочной к кислотной среде и составляет для Thy 0,81, 0,80, 0,78, 0,76 и 0,43 ккал/моль, а для 5Cl-Ura — 0,55, 0,50, 0,45 ккал/моль.

Сравнение с результатами более ранних расчетов, выполненных для потенциальных функций водородных связей N—H...O без учета влияния среды, показывает, что расстояние между отдельными уровнями составляет  $6 \div 9$  ккал/моль, а величина расщепления туннельных уровней равна  $0,5 \div 1$  ккал/моль [21]. Согласно полученным расчетам, влияние pH среды приводит к уменьшению расстояний между энергетическими уровнями туннелирования, которые становятся сравнимы с величиной расщепления колебательных уровней. Это, в свою очередь, приводит к возможности одновременного существования разных молекулярных структур, а именно: анионов, цвиттер-ионных форм, нейтральных таутомерных форм или нейтральных таутомеров и катионов, что и наблюдается в эксперименте (см. табл. 1).

Влияние pH среды сказывается и на относительном расположении колебательных уровней, для которых наблюдается туннельный эффект. В отличие от изолированных молекул перенос протона в водной среде, согласно полученным результатам расчета времени жизни, происходит с уровней, расположенных ниже  $1/2 U_0$  потенциального барьера, т.е. туннельные переходы вблизи вершины потенциального барьера менее вероятны. Очевидно, что это связано с существенно меньшим заселением этих уровней (по Больцману), поэтому такие туннельные переходы экспериментально не фиксируются.

Необходимо отметить, что при расчете времени жизни для рассматриваемых таутомеров 321, 121 и 141 были взяты те же частоты, что и для Thy (аналогичное замечание можно сделать для 5Cl-Ura). Поскольку вычисленные значения времени жизни очень чувствительны к частоте перехода, то точное знание частот валентных колебаний связей NH и OH, а также частот колебаний водородных связей N...N и O...N таутомеров при разных pH (что экспериментально не-

известно) позволит с помощью пикосекундных спектров проводить однозначную интерпретацию таутомерных форм при разных рН.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, результаты расчета воспроизводят и подтверждают наличие трех временных интервалов, характеризующих присутствие в водной среде при разных рН определенного типа молекулярных образований, а именно, анионов, нейтральных оксо- и гидрокситаутомерных форм Thy и 5Cl-Uга, а также их катионов.

Вычисленные временные характеристики количественно согласуются с экспериментальными значениями, полученными из пикосекундных спектров [ 6, 7 ].

Существует несколько энергетических уровней туннелирования протона, характерных для рН среды и отстоящих друг от друга на  $\sim 1$  ккал/моль.

Расчет показал, что процесс переноса протона в зависимости от рН среды может происходить как с переносом одного протона (образование цвиттер-ионных форм), так и с одновременным переносом протонов вдоль водородных связей.

Данные расчеты в сочетании с экспериментально измеренными значениями частот  $\nu(\text{NH})$ ,  $\nu(\text{OH})$ ,  $\nu(\text{N}\dots\text{H})$ ,  $\nu(\text{O}\dots\text{H})$  для разных рН позволяют определять таутомерный состав ОНК.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dantus M., Rosker M.J., Zewail A.H. // J. Chem. Phys. – 1987. – **87**. – P. 2395 – 2397.
2. Rose T.S., Rosker M.J., Zewail A.H. // Ibid. – 1988. – **88**. – P. 12427 – 12446.
3. Семиохин И.А., Страхов В.В., Осипов А.И. Химическая кинетика. – М.: Изд-во МГУ, 1995.
4. Эйринг Г., Лиин С.Г., Лиин С.М. Основы химической кинетики. – М.: Мир, 1983.
5. Goodman M.F. // Nature. – 1995. – **378**. – P. 237 – 238.
6. Morsy M.A., Al-Somali A.M., Suwaiyan A. // J. Phys. Chem. – 1999. – **103B**. – P. 11205 – 11210.
7. Suwaiyan A., Morsy M.A., Odah K.A. // Chem. Phys. Lett. – 1995. – **237**. – P. 349 – 355.
8. Кочетков Н.К., Будовский Э.И., Свердлов Е.Д. и др. Органическая химия нуклеиновых кислот. – М.: Химия, 1970.
9. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – М.: Мир, 1987.
10. Жижина Г.П., Олейник Э.Ф. // Успехи химии. – 1972. – **41**. – С. 474 – 511.
11. Löwdin P.O. // Advan. Quant. Chem. – 1965. – **2**. – P. 213 – 360.
12. Susi H., Ard J.S. // Spectrochim. Acta. – 1974. – **30A**. – P. 1843 – 1853.
13. Shimanouchi T., Harada I. // J. Chem. Phys. – 1964. – **41**. – P. 2651 – 2655.
14. Ingham K.C., El-Bayoumi M.A. // J. Amer. Chem. Soc. – 1974. – **96**. – P. 1674 – 1682.
15. Jeffrey G.A., Saenger W. Hydrogen Bonding in Biological Structures. – Berlin: Springer, 1991.
16. Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И. // Журн. структур. химии. – 2007. – **48**. – С. 482 – 490.
17. Тен Г.Н., Баранов В.И. // Там же. – С. 934 – 941.
18. Робертс Дж., Касерно М. Органическая химия. – М.: Мир, 1978.
19. Lippincott E.R., Schröder R. // J. Chem. Phys. – 1955. – **23**. – P. 1099 – 1106.
20. Ладик Я. Квантовая биохимия для химиков и биологов. – М.: Мир, 1974.
21. Biczó G., Ladik J., Gergely J. // Acta Phys. Acad. Sci. Hung. – 1966. – **20**. – P. 11 – 23.