

Гидратация фрагмента дуплекса В-формы ДНК: d(GGGGG). Метод атом-атомных корреляционных функций в приближении RISM.

Д.А. Тихонов¹ Р.В. Полозов,¹ А.В. Горелов,² К.А. Доусон²
Э.Г. Тимошенко,² Ю.А. Кузнецов,² Л.А. Панченко,³

Аннотация

На основе численного алгоритма решения интегральных уравнений теории жидкости в приближении RISM для бесконечно разбавленных водных растворов макромолекул [1] вычислены все атом-атомные корреляционные функции фрагмента дуплекса ДНК d(GGGGG) и воды. Полученные результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными и результатами численного моделирования гидратации ДНК.

1 Введение.

Структуры ДНК, комплексов ДНК с белками и лигандами сложным образом зависят от физико-химических свойств растворителя, а сольватация и ионные взаимодействия во многих аспектах определяют специфичность узнавания ДНК белками и лигандами. Сведения о структуре гидратных оболочек биологических молекул доступны в основном из опытов по рентгеновскому и нейтронному рассеянию на кристаллах (см. например [2, 3]), и ЯМР биологических молекул в растворе [4, 5, 6]. В настоящее время мы не имеем полной и непротиворечивой теории физических явлений, происходящих в полиэлектролитных системах нуклеиновых кислот и белков.

Если выделить проблему гидратации биополимеров, то постановке задач, методам их решения, трудностям с которыми сталкиваются исследователи, результатам расчетов и их интерпретации посвящены обзоры [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15], в которых можно найти большое число ссылок на оригинальные работы. В этой области исследований имеется огромное число задач все возрастающей сложности, это оправдывает введение, разработку и использование различных методов компьютерного моделирования, применение которых диктуется типом задачи, размерами изучаемой системы и вычислительными ресурсами. Наиболее широкое применение для решения задач сольватации биополимеров получили методы прямого численного моделирования - методы молекулярной динамики и методы Монте-Карло [16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]. Однако при расчетах гидратации макромолекул методами Монте-Карло и молекулярной динамики приходится тратить очень много вычислительного времени для того, чтобы достичь равновесных значений вычисляемых структурных и термодинамических величин. Эта трудность - медленная сходимость вычисляемых величин - не имеет места в методах, опирающихся непосредственно на методологию статистической механики. В последнее время в этом направлении исследований для решения задач гидратации систем с большим числом атомов был развит эффективный многообещающий метод, основанный на формализме потенциала средней силы [36, 37, 38]. Вычислительной альтернативой прямому численному моделированию гидратации макромолекул является также метод интегральных уравнений теории жидкостей в приближении RISM [39]. В данной работе мы применяем уравнения RISM для расчета гидратации дуплекса В-формы ДНК: d(GGGGG). Обсуждение метода и алгоритм решения интегральных уравнений RISM для макромолекул приведен в работе [1].

2 Исходные данные и результаты расчетов.

Геометрия дуплекса ДНК выбиралась стандартной, согласно работе [43]. Потенциалы взаимодействия атомов нуклеотидов с атомами молекулы полагались одинаковыми вне зависимости от положения нуклеотида в дуплексе. Потенциалы взаимодействия атомов ДНК с атомами молекулы воды были взяты из работ [44, 45]. При этом функциональная форма потенциала взаимодействия выбиралась различной в зависимости от того, участвует ли данный атом в образовании водородной связи с водой или нет.

Для атомов, не участвующих в водородной связи, потенциал взаимодействия имеет следующий вид:

$$U_{iX}(r) = \frac{q_i q_X}{r} + A_{iX}/r^{12} - B_{iX}/r^6. \quad (1)$$

В том случае, когда атом участвует в образовании водородной связи, выбиралось следующее выражение для потенциала:

$$U_{iX}(r) = \frac{q_i q_X}{r} + A'_{iX}/r^{12} - B'_{iX}/r^{10}, \quad (2)$$

где q_i — парциальные заряды атомов нуклеотидов, q_X — парциальные заряды атомов молекулы воды, r — межатомные расстояния. Численные значения параметров и парциальные заряды приведены в табл. 1-3. Параметры потенциала выражены в p/r , где p соответствует степени расстояния r в формулах (1),(2). Заряды на атомах выражены в единицах заряда электрона. Выбранные атом-атомные потенциалы использовались во многих расчетах конформаций ДНК, гидратации ДНК и показали хорошее согласие вычисленных и опытных величин [30, 35].

Корреляционные функции чистой воды при нормальной плотности $1/3$ и температуре 25°C рассчитывались методом RISM для потенциальной модели TIPS [46]. Все расчеты выполнялись в гиперцепном замыкании.

На рис. приведены рассчитанные нами корреляционные функции атомов дуплекса ДНК с атомами молекулы воды. В каждой строке (слева - направо) помещены корреляционные функции, относящиеся к одному атому для каждой нуклеотидной пары дуплекса В-формы ДНК: d(GGGGG), начиная с 5'-конца цепи гуанинов. Кроме того, корреляционные функции в вертикальном направлении (сверху - вниз) упорядочены в порядке убывания атом-атомных корреляционных функций, от N2 гуанина (G N2) до C4 гуанина (G C4).

Величины первых пиков корреляционных функций меняются от 4 до 0.4. Большие значения корреляционных функций наблюдаются для гетероатомов азотистых оснований, а также для кислородов сахарофосфатного остова. Значения первых пиков меньше единицы относятся к тем атомам, которые встроены внутрь ДНК, тем самым экранируются другими атомами от непосредственного контакта с молекулами воды, в основном это относится к атомам углерода.

На каждом рисунке сплошная линия относится к корреляционной функции: атом дуплекса — атом кислорода молекулы воды, пунктирная линия относится к корреляционной функции: атом дуплекса — атом водорода молекулы воды.

Рассмотрим по отдельности гидратацию азотистых оснований, сахарофосфатного остова, а также характерные особенности гидратации большого и малого желобов ДНК.

2.1 Гидратация азотистых оснований.

Наиболее высокие корреляционные пики относятся к атомам азота гуанина: N2 и N7. Положение пика корреляционной функции: атом водорода молекулы воды — атом N7 сдвинуто относительно пика корреляционной функции: атом кислорода воды — атом N7. Положение пиков атом N2 — атом кислорода воды и атом N2 — атом водорода воды совпадают. Кроме того, величина первого пика корреляционной функции атом N2 — атом водорода, значительно меньше чем величина соответствующего пика для атома N7. По данным расчетов методом Монте-Карло [30] это различие в характере и величине гидратации атомов N7 и N2 является следствием того, что атом N7 — акцептор протона, а атом N2 — донор протона в водородной связи. Очевидно это должно приводить к различию в ориентации воды вокруг указанных атомов, что и проявляется на корреляционных функциях.

Характерным отличием гидратации этих атомов вдоль цепи дуплекса является то, что гидратация N7 не меняется вдоль цепи дуплекса, в то время как, гидратация N2 растет от концов к середине дуплекса, возрастая приблизительно в 1.5 раза.

Tab. 1: Параметры потенциала взаимодействия ДНК-вода.

Атом	A_{iH}	B_{iH}	A_{iO}	B_{iO}	q_i
G P	363	256000	837	989000	0.816
G C5*	100	70600	217	256000	0.014
G 1H5*	40	7740	86	31300	0.053
G 2H5*	40	7740	86	31300	0.053
G C4*	100	70600	217	256000	0.097
G H4*	40	7740	86	31300	0.051
G C1*	100	70600	217	256000	0.139
G H1*	40	7740	86	31300	0.055
G N9	126	23300	278	419000	-0.032
G C8	126	27300	274	460000	0.223
G H8	40	5500	79	12000	0.068
G C5	126	27300	274	460000	0.028
G C6	126	27300	274	460000	0.342
G N1	126	23300	278	419000	-0.253
G C2	126	27300	274	460000	0.547
G N2	98	9300	233	361000	-0.417
G C4	126	27300	274	460000	0.292
G C3*	100	70600	217	256000	0.082
G H3*	40	7740	86	31300	0.054
G C2*	100	70600	217	256000	-0.045
G 1H2*	40	7740	86	31300	0.045
G 2H2*	40	7740	86	31300	0.045
C P	363	256000	837	989000	0.816
C C5*	100	70600	217	256000	0.014
C 1H5*	40	7740	86	31300	0.053
C 2H5*	40	7740	86	31300	0.053
C C4*	100	70600	217	256000	0.097
C H4*	40	7740	86	31300	0.051
C C1*	100	70600	217	256000	0.139
C H1*	40	7740	86	31300	0.055
C N1	126	23300	278	419000	-0.094
C C6	126	27300	274	460000	0.242
C H6	40	5500	79	12000	0.06
C C5	126	27300	274	460000	-0.157
C H5	40	5500	79	12000	0.055
C C4	126	27300	274	460000	0.4
C N4	98	9300	233	361000	-0.431
C C2	126	27300	274	460000	0.439
C C3*	100	70600	217	256000	0.082
C H3*	40	7740	86	31300	0.054
C C2*	100	70600	217	256000	-0.045
C 1H2*	40	7740	86	31300	0.045
C 2H2*	40	7740	86	31300	0.045

Tab. 2: Параметры потенциала взаимодействия ДНК-вода.

Атом	A'_{iH}	B'_{iH}	A_{iO}	B_{iO}	q_i
G O1P	4570	12600	245	153000	-0.33
G O2P	4570	12600	245	153000	-0.33
G O5*	4570	12600	200	129000	-0.22
G O4*	4570	12600	200	129000	-0.272
G N7	9100	27400	330	473000	-0.541
G O6	7350	21400	283	283000	-0.371
G N3	9100	27400	330	473000	-0.628
G O3*	4570	12600	200	129000	-0.22
C O1P	4570	12600	245	153000	-0.33
C O2P	4570	12600	245	153000	-0.33
C O5*	4570	12600	200	129000	-0.22
C O4*	4570	12600	200	129000	-0.272
C N3	9100	27400	330	473000	-0.665
C O2	7350	21400	283	283000	-0.39
C O3*	4570	12600	200	129000	-0.22

Tab. 3: Параметры потенциала взаимодействия ДНК-вода.

Атом	A_{iH}	B_{iH}	A'_{iO}	B'_{iO}	q_i
G H1	40	3800	3760	9700	0.196
G 1H2	40	3800	3760	9700	0.231
G 2H2	40	3800	3760	9700	0.231
C 1H4	40	3800	3760	9700	0.229
C 2H4	40	3800	3760	9700	0.229

Кислород O2 цитозина участвует в водородной связи с аминогруппой гуанина через атом 1Н2, а кислород O6 гуанина образует водородную связь с аминогруппой цитозина через атом 2Н4. Корреляционные функции этих двух атомов аналогичны. Характерной особенностью этих функций является рост первых пиков от концов к середине дуплекса, аналогично тому, как это имеет место для атома N2 гуанина. Точно так же атомы кислорода участвуют в образовании водородной связи с водой, чему свидетельствуют смещенные пики корреляционных функций с атомом водорода воды.

Водороды аминогрупп гуанина 2Н2, 1Н2 и цитозина 1Н4, 2Н4 сильно отличаются по характеру гидратации. Протоны, участвующие в водородной связи с кислородами O2 и O6, имеют приблизительно в два раза меньший первый корреляционный пик, по сравнению с пиками корреляционных функций гуанина 2Н2 и цитозина 1Н4. Это неудивительно, поскольку протоны 2Н2 и 1Н4 открыты для молекул воды, а 2Н4 и 1Н2 практически не гидратируются.

Гидратация атомов N1 гуанина и N3 цитозина, которые участвуют в водородной связи между гуанином и цитозином, сильно отличается друг от друга. Отличие наблюдается в величине первого корреляционного пика с атомом водорода. Атом N3 цитозина имеет большой парциальный заряд (порядка -0.7), что обуславливает смещение корреляционных пиков водорода и его относительно большую величину, при этом первый пик корреляционной функции с атомом кислорода немного меньше единицы для внутренних нуклеотидов дуплекса, это означает что, как и в случае с атомом N1 вода слабо проникает в межплоскостное пространство соседствующих нуклеотидных пар.

Атом N3 гуанина частично экранирован от молекул воды атомами аминогруппы, поэтому он гидратирован в меньшей степени, чем атом N7. Хотя атом N3 имеет больший парциальный заряд (-0.63), чем атом N7 (-0.54).

Атомы азота N9 гуанина и N1 цитозина, участвующие в гликозидной связи не гидратируются.

2.2 Гидратация сахарофосфатного остова

Корреляционные функции атома O1P цитидилового нуклеотидного остатка на 5' конце меньше, чем в остальных четырех нуклеотидных парах, напротив, атом O2P цитидилового нуклеотида на 5' конце имеет более высокое значение корреляционного пика, чем в остальных парах. То же самое мы наблюдаем для атомов кислорода фосфатной группы гуанилового остатка.

Атомы фосфора цитидилового и гуанилового остатков гидратируются практически одинаково, за исключением концевых атомов 5', где первый корреляционный пик становится более пологим.

Что касается гидратации дезоксирибозы, то надо отметить, что наиболее хорошо гидратируется кольцевой атом O4*, причем на 5' конце корреляционный пик меньше для гуанилового остатка.

Кислороды O3* гуанилового и цитидилового остатков не гидратируются, за исключением атомов расположенных на 3' концах, что хорошо видно на рисунке. Гидратация атомов G O5* и C O5* не отличается друг от друга. В отличие от атома O3* гидратация концевых и срединных атомов O5* одинакова.

Остальные атомы углерода и водорода сахарофосфатного остова гидратируются довольно слабо.

2.3 Гидратация малого и большого желобов

Сильная гидратация, наблюдаемая для атомов N7, O6 гуанина и N4 цитозина, качественно соответствует областям гидратации W1 и W2, представленным в работе [47], а гидратация атомов O2 цитозина и атомов N3, N2, 2Н2 гуанина соответствует области S1, приведенной в той же работе.

Нами уже отмечалось, что первые пики корреляционных функций гетероатомов, участвующих в водородной связи между гуанином и цитозином: N2, O6, N4, O2, растут от концов дуплекса к его середине. С другой стороны из расчетов сольватации одноатомных неполярных цепочек [42] известно, что первый пик корреляционной функции для концевых атомов значительно выше чем, для внутренних атомов, что вполне объяснимо из стерических соображений. Такое отличие в поведении сольватации может объясняться двумя факторами: наличием больших парциальных зарядов на гетероатомах, а также геометрией уотсон - криковской пары гуанин - цитозин. По - видимому этот эффект имеет кооперативный характер и связан с ориентационным упорядочением молекул воды в желобах.

Численные значения вычисленных нами корреляционных функций вполне согласуются с результатами расчетов, проведенных в работе [36], где рассчитывалась микроскопическая плотность атомов кислорода и водорода воды в области прилегающей к малому и большому желобам в рамках формализма потенциала средней силы.

3 Заключение.

В заключении мы обсудим те приближения, которые мы использовали при расчетах.

Основанием для выбора длины дуплекса было следующее обстоятельство – наши расчеты показали, что уже при длине дуплекса, равной пяти нуклеотидным парам, влияние концов на гидратацию центральной пары почти не сказывается. Это хорошо видно на рисунке, поскольку в большинстве случаев корреляционные функции предконцевой и центральной пар одинаковы. Следовательно, можно считать, что сольватация центральной нуклеотидной пары на конечном отрезке цепи не отличается от сольватации нуклеотидной пары, встроенной в бесконечную цепь (отметим, что сольватация одноатомных неполярных цепочек в водной среде [42] аналогична в этом отношении сольватации ДНК).

В данной работе мы исследуем гидратацию фрагмента ДНК, состоящего из одинаковых нуклеотидных пар. По-видимому, наши выводы могут быть отнесены и к произвольной последовательности пар, включающей G:C пары: следует ожидать, что гидратация сахарафосфатного остова ДНК практически не зависит от гидратации конкретной последовательности азотистых оснований. Исследование тонкой зависимости гидратации нуклеотидной пары в цепи от типа соседних пар выходит за рамки нашей работы.

В наших расчетах мы полагали геометрическую структуру дуплекса жесткой. Есть основания считать, что гидратация гибкой или изогнутой двойной спирали отличается от гидратации жесткой структуры. Мы полагаем, что гибкость пятичленного дуплекса недостаточна для того, чтобы эти эффекты сильно проявлялись. С другой стороны, метод RISM дает возможность вычислять потенциалы средней силы в зависимости от конкретной геометрии молекулы, что в конечном итоге позволяет решать задачу об оптимальной геометрии ДНК в воде.

Мы отдаем себе отчет в том, что выбранная нами молекулярная модель, в которой молекула ДНК является электронейтральной за счет параметрического учета экранировки фосфатов, ограничена. Тем не менее, существующий опыт расчетов гидратации ДНК различными методами свидетельствует о том, что в области ограниченной первой координационной сферой это приближение является вполне адекватным [48, 27, 30]. Используемый нами метод не имеет внутренних ограничений для включения в модель свободных подвижных ионов, что позволяет исследовать макромолекулы в ионном растворе.

Наши результаты позволяют заключить, что гидратация атомов нуклеотидов в цепи ДНК зависит в главном лишь от структуры их ближайшего окружения – то есть по существу носит локальный характер.

Мы выражаем благодарность В.И. Полтеву и О.А. Морневу за обсуждение результатов работы и полезные советы.

Данная работа выполнена при поддержке гранта INTAS-93-2084.

Список литературы

- [1] Тихонов Д.А., Полозов Р.В., Горелов А.В., Тимошенко Э.Г., Кузнецов Ю.А., Панченко Л.А., Доусон К.А. // Биофизика. 1997. Т. 42, вып. 5. С.
- [2] Savage H., Wlodawer A. // Meth. Enzymol. 1986. V. 127. P. 162.
- [3] Dickerson R.E. // Meth. Enzymol. 1992. V. 211. P. 67.
- [4] Otting G., Liepinsh E., Wuthrich K. // Science 1991. V. 254. P. 974.
- [5] Liepinsh E., Otting G., Wuthrich // Nucl. Acids Res. 1992. V. 20. P. 6549.
- [6] Kubinec M.G., Wemmer D.E. // J. Amer. Chem. Soc. 1992. V. 114. P. 8739.
- [7] Texter J. // Prog. Biophys. Mol. Biol. 1978 V. 33, P. 83.
- [8] Berendsen H.J.C, Postma J.P.M., Van Gunsteren W.F., Hermans J. // Proc. 14th Jerusalem Symp. on Quantum Chemistry and Biochemistry, Pullman B. Ed., Reidel, Dordrecht, The Netherlands, 1981. P. 331.
- [9] Букин В.А. // Молекуляр. биология. 1987. Т. 21, вып. 3. С. 615.

- [10] Saenger W. // *Annu. Rev. Biophys. Biophys. Chem.* 1987 V. 16, P. 93.
- [11] Westhof E., Beveridge D.L. // *Water Science Reviews*, Franks F., Ed., Cambridge University Press. 1990. V. 5, P. 24.
- [12] Westhof E. // *Structural Water of Nuclear Acids*. Westhof E., Ed., Academic Press. 1990. P. 11.
- [13] Berman H. M. // *Curr. Opin. Struct. Biol.* 1991 V. 1, P. 423.
- [14] Levitt M., Park B.H., // *Structure*. 1993. V. 1, N. 4, P. 223.
- [15] Berman H. M. // *Curr. Opin. Struct. Biol.* 1994. V. 4, P. 345.
- [16] Clementi E., Corongiu G. // *Biopolymers*. 1981. V. 20. P. 551.
- [17] Clementi E., Corongiu G. // *Biopolymers*. 1981. V. 20. P. 2427.
- [18] Clementi E., Corongiu G. // *Biopolymers*. 1982. V. 21. P. 763.
- [19] Bacquet R., Rossky P.J. // *J. Phys. Chem.* 1984. V. 88. P. 2660.
- [20] Murthy C.S., Bacquet R.J., Rossky P.J. // *J. Phys. Chem.* 1985. V. 89. P. 701.
- [21] Hingerty B.E., Ritche R.H., Ferrel T.L., Turner J.E. // *Biopolymers*. 1985. V. 24. P. 427.
- [22] Mills P., Anderson C.F., Record T.M., Jr. // *J. Phys. Chem.* 1985. V. 89. P. 3984.
- [23] Van Gunsteren W.F., Berendsen H.J.C., Geurtsen R.G., Zwinderman H.R.J. // *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1986. V. 482. P. 297.
- [24] Elliot R.J., Goodfellow J.M. // *J. Theor. Biol.* 1987. V. 127. P.403.
- [25] Eisenhaber F., Tumanyan V.G., Eisenmenger F., Gunia W. // *Biopolymers*. 1989. V. 28. P. 741.
- [26] Jayaram B., Swaminathan S., Beveridge D.L. // *Macromolecules*. 1990. V. 23. P. 3156.
- [27] Chuprina V.P., Heinemann U., Nurislamov A.A., Zielenkiewicz P., Dickerson R.E., Saenger W. // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 1991. V. 88. P. 593.
- [28] Forester T.R., McDonald I.R. // *Mol. Phys.* 1991. V. 72. P. 643.
- [29] Herzyk P., Goodfellow J.M., Neidle S. // *J. Biomol. Struct. Dyn.* 1991. V. 9. P. 363.
- [30] Teplukhin A.V., Poltev V.I., Chuprina V.P. // *Biopolymers*. 1992. V. 32. P. 1445.
- [31] York D.M., Darden T.A., Pedersen L.G. // *J. Chem. Phys.* 1993. V. 99. P. 8345.
- [32] Beveridge D.L., Ravisbanker G. // *Curr. Opin. Struct. Biol.* 1994. V. 4. P. 246.
- [33] Cheatham T.E.,|||, Miller J.L., Fox T., Darden T.A., Kollman P.A. // *J. Amer. Chem. Soc.* 1995. V. 117. P. 4193.
- [34] Cheatham T.E.,|||, Kollman P.A. // *J. Mol. Biol.* 1996. V. 259. P. 434.
- [35] Теплухин А.В., Журкин В.Б., Джерниган Р., Полтев В.И. // *Молекуляр. биология*. 1996. Т. 30, вып. 1. С. 121.
- [36] Hummer G., Soumpasis D.M. // *Proc. Eighth Conversations in the Discipline Biomolecular Stereodynamics*. Sarma R.H, Sarma M.H., Eds. Adenine Press, Schenectady. 1994. V. 2. P. 273.
- [37] Hummer G., Soumpasis D.M., // *Phys. Rev. E*. 1994. V. 50. P. 5085.
- [38] Hummer G., Soumpasis D.M., Garcia A.E. // *Biophys. J.* 1994. V. 66. P. A25.
- [39] Chandler D., Andersen H.C. // *J. Chem. Phys.* 1972. V. 57, N 5. P. 1930.

- [40] Monson P.A., Morriss G.P. // *Adv. Chem. Phys.* / Eds., I. Prigogine and S. Rice. 1990 V. 77 P. 451.
- [41] Hirata F., Levy R.M. // *Chem. Phys. Lett.* 1987. V. 136 P. 267.
- [42] Тихонов Д.А., Саркисов Г.Н. // *Журн. физ. химии.* 1997. Т. 71. С. 480.
- [43] Landoldt-Bornstein Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, V|| / 1b, W. Saenger, ed., Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [44] Poltev V.I., Tepelukhin A.V., Malenkov G.G. // *Int. J. Quant. Chem.* 1992. V. 42 P. 1499.
- [45] Журкин В.Б., Полтев В.И., Флорентьев В.Л. // *Молекуляр. биология.* 1980. Т. 14. С. 1116.
- [46] Jorgensen W.L. // *J. Amer. Chem. Soc.* 1981. V. 103. P. 341.
- [47] Schneider B., Cohen D.M., Schleifer L., Srinivasan A.R., Olson W.K., Berman H.M. // *Biophys. J.* 1993. V. 65. P. 2291.
- [48] Hummer G., Garcia A.E., Soumpasis D.M. // *Biophys. J.* 1995. V. 68. P. 1639.

Подпись к рисунку

Атом–атомные корреляционные функции: дуплекс ДНК d(GGGGG)—молекула воды.

HYDRATION OF B-DNA FRAGMENT d(GGGGG) IN THE METHOD OF ATOM-ATOM
CORRELATION FUNCTIONS IN THE RISM APPROXIMATION.

D.A. Tikhonov, R.V. Polozov

Institute of Theoretical and Experimental Biophysics, Russian Academy of Sciences

A.V. Gorelov, E.G. Timoshenko, Yu.A. Kuznetsov
Department of Chemistry, University College Dublin

L.A. Panchenko

Moscow M.V. Lomonosov State University

K.A. Dawson

Department of Chemistry, University College Dublin

Based on the numerical algorithm proposed by us in [1] for solving integral equations of the theory of liquids in the RISM approximation we calculate all of the solvent-solute atom-atom correlation functions for a fragment of the DNA duplex d(GGGGG) in infinitely diluted aqueous solution. The obtained results are compared with available experimental data and results from computer simulations.