

УДК: 544.77

Механизм диссоциации пары цитозинов, опосредованных ионами серебра

П. Н. Клюев, Р. Р. Рамазанов^а

Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет,
Россия, 198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, ул. Ульяновская, д. 1

E-mail: ^а r.ramazanov@spbu.ru

Получено 30.04.2019, после доработки — 02.07.2019.

Принято к публикации 02.07.2019.

Разработка структурированных молекулярных систем на основе каркаса из нуклеиновых кислот учитывает способность одноцепочечной ДНК к образованию стабильной двухспиральной структуры за счет стэкинг-взаимодействий и водородных связей комплементарных пар нуклеотидов. Для увеличения стабильности двойной спирали ДНК и расширения температурного диапазона в протоколах гибридизации предложили использовать более стабильные металл-опосредованные комплексы пар нуклеотидов в качестве альтернативы уотсон-криковским водородным связям. Один из наиболее часто рассматриваемых вариантов — использование ионов серебра для стабилизации пары цитозинов из противоположных нитей ДНК. Ионы серебра специфично связываются с атомами N3 цитозинов вдоль оси спирали с образованием, как считается, прочной связи N3–Ag⁺–N3, относительно которой может образоваться два вращательных изомера — цис- и транс-конфигурации Cyt–Ag⁺–Cyt. В работе были проведены теоретическое исследование и сравнительный анализ профиля изменения свободной энергии (ПСЭ) диссоциации двух изомеров Cyt–Ag⁺–Cyt с использованием комбинированного метода молекулярной механики и квантовой химии (КМ/ММ). В результате было показано, что цис-конфигурация более выгодна по энергии чем транс- для одиночной пары цитозинов, а геометрия глобального минимума на ПСЭ для обоих изомеров отличается от равновесных геометрий, полученных ранее методами квантовой химии. По-видимому, модель стабилизации ионами серебра дуплекса ДНК должна учитывать не только непосредственное связывание ионов серебра с цитозинами, но и наличие сопутствующих факторов, таких как стэкинг-взаимодействие в протяженной ДНК, межплоскостные водородные связи, а также металлофильное взаимодействие соседних ионов серебра.

Ключевые слова: ДНК, цитозины, ионы серебра, КМ/ММ, профиль свободной энергии

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 17-73-10070.

UDC: 544.77

The mechanism of dissociation of cytosine pairs mediated by silver ions

P. N. Kliuev, R. R. Ramazanov^a

Faculty of Physics, Saint Petersburg State University,
1 Ulyanovskaya st., Peterhof, Saint-Petersburg, 198504, Russia

E-mail: ^a r.ramazanov@spbu.ru

Received 30.04.2019, after completion — 02.07.2019.

Accepted for publication 02.07.2019.

The development of structured molecular systems based on a nucleic acid framework takes into account the ability of single-stranded DNA to form a stable double-stranded structure due to stacking interactions and hydrogen bonds of complementary pairs of nucleotides. To increase the stability of the DNA double helix and to expand the temperature range in the hybridization protocols, it was proposed to use more stable metal-mediated complexes of nucleotide pairs as an alternative to Watson-Crick hydrogen bonds. One of the most frequently considered options is the use of silver ions to stabilize a pair of cytosines from opposite DNA strands. Silver ions specifically bind to N3 cytosines along the helix axis to form, as is believed, a strong N3–Ag⁺–N3 bond, relative to which, two rotational isomers, the cis- and trans-configurations of C–Ag⁺–C can be formed. In present work, a theoretical study and a comparative analysis of the free energy profile of the dissociation of two C–Ag⁺–C isomers were carried out using the combined method of molecular mechanics and quantum chemistry (QM/MM). As a result, it was shown that the cis-configuration is more favorable in energy than the trans- for a single pair of cytosines, and the geometry of the global minimum at free energy profile for both isomers differs from the equilibrium geometries obtained previously by quantum chemistry methods. Apparently, the silver ion stabilization model of the DNA duplex should take into account not only the direct binding of silver ions to cytosines, but also the presence of related factors, such as stacking interaction in extended DNA, interplanar hydrogen bonds, and metallophilic interaction of neighboring silver ions.

Keywords: DNA, cytosines, silver ions, QM / MM, free energy profile

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2019, vol. 11, no. 4, pp. 685–693 (Russian).

The work was supported by RSF grant No. 17-73-10070.

Введение

Образование комплексов ионов металлов и нуклеотидов в качестве альтернативы образованию водородных связей вызывает интерес в области создания сложных упорядоченных ДНК структур с повышенной устойчивостью к различным факторам — температуре, pH, ионной силе раствора [Clever, Shionoya, 2012; Jash, Müller, 2017a; Jash, Müller, 2017b]. Основная стратегия заключается в замене атомов водорода, образующих водородные связи между нуклеотидами противоположных цепочек, на ионы металла. Такая замена приводит к стабилизации двойной спирали ДНК благодаря образованию координационных связей иона металла с донорами электронной плотности, такими как атомы N или O. Наиболее удобным вариантом подобной стабилизации считают использование двух цитозинов из разных цепочек ДНК, между которыми помещается ион серебра и образуется комплекс C–Ag⁺–C [Day et al., 2013; Guo et al., 2014; Houlton et al., 2019]. При нейтральном pH цитозин в растворе находится в депротонированной форме по позиции N3, где в комплементарной паре с гуанином образуется водородная связь. При растворении соли серебра, например AgNO₃, диссоциированный ион серебра проникает между неспаренных цитозинов и связывается с атомами N3 обоих, сшивая при этом дуплекс ДНК. Поскольку связь Ag⁺–N3 длиннее связи H⁺–N3, расстояние между Ag⁺-опосредованными цитозинами становится больше, что компенсирует недостаточную близость между двумя пуриновыми нуклеотидами в В-форме спирали ДНК. Таким образом, ион серебра может стабилизировать ДНК без искажения ее вторичной структуры. Описанные представления в основном были получены методами структурного ЯМР и кристаллографии [Dairaku et al., 2016a; Dairaku et al., 2016b; Dairaku et al., 2016c; Kondo et al., 2015; Kondo et al., 2017; Tanaka et al., 2015]. В экспериментах было выявлено, что ДНК в присутствии ионов серебра может образовывать дуплексы с параллельной [Müller, 2017; Swasey et al., 2018] и антипараллельной [Clever et al., 2007; Ono et al., 2011] укладкой цепей. Две геометрии изомерных форм C–Ag⁺–C, соответствующие параллельной и антипараллельной укладкам, были определены как транс- и цис-конфигурация соответственно (рис. 1).

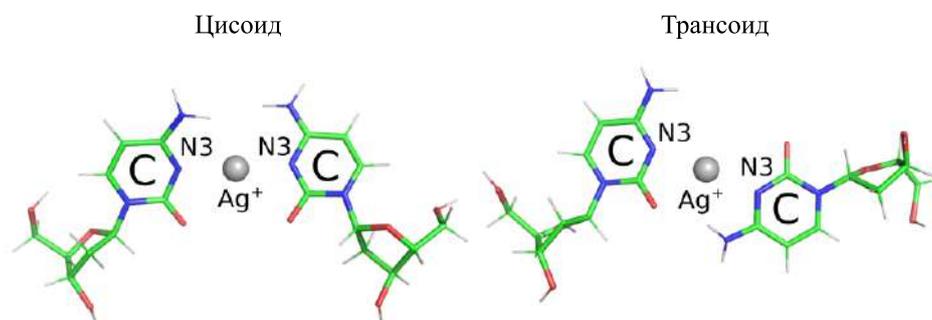


Рис. 1. Равновесные конфигурации цис- и транс-комплекса пары цитидинов с ионом серебра

В структурных работах отмечают, что в случае образования вторичной структуры ДНК преимущественно посредством комплементарных спариваний азотистых оснований при последующем добавлении ионов серебра образуются цис-конфигурации пар противоположащих цитозинов. Это происходит вследствие стерических ограничений, поскольку в стандартных условиях при гибридизации в двойную спираль В-формы ДНК образуется антипараллельная ориентация одиночных нитей, которой соответствует цис-конфигурация противоположащих цитозинов. В тех случаях, когда доля комплементарных пар не велика или нити полностью не комплементарны, возможно образование двойной спирали посредством ионов серебра с образованием транс-конфигурации противоположащих цитозинов. Например, в кристаллографической работе Хуарда и др. [Huard et al., 2019] три соседние пары цитозина образуют транс-конфигурацию, стабилизируя остальную часть ДНК из одной пары цитозинов и двух пар аденинов, на которой растет люминесцирующий кластер. Для объяснения механизма комплексообразования прово-

дились теоретические исследования равновесных конфигураций изолированных пар цитозинов с использованием квантово-химических методов. Так, с использованием теории функционала плотности с поправкой на дисперсионные взаимодействия были рассчитаны энергии взаимодействия цитозинов в транс- и цис-конфигурации в условиях континуальной модели растворителя [Megger et al., 2011]. Расчеты показали, что обе конфигурации имеют очень близкие энергии, а следовательно, нет преимущества у одной из форм. Другие расчеты димера $(C-Ag^+-C)_2$ с использованием комбинированного метода КМ/ММ для транс-конфигурации двух пар цитозинов показали, что происходит вращение цитозинов относительно связи $N3-Ag^+-N3$ и образуются межплоскостные водородные связи, приводящие к дополнительной стабилизации дуплекса [Espinosa Leal et al., 2015]. Из этих расчетов было не очевидно, что модель вращения одного димера 5'-СС-3' относительно другого с образованием дополнительных водородных связей можно применить к более протяженной ДНК. Поскольку равновесные геометрии комплексов пар цитозинов с ионами серебра, полученные разными методами квантовой химии, с некоторым допущением соответствуют геометриям этих комплексов, наблюдаемым в кристаллографии и ЯМР, многие исследователи приняли идею, что основной вклад в стабилизацию ДНК вносит непосредственное связывание ионов серебра с нуклеотидами. Однако детальное рассмотрение параметров длин связей Ag^+-N3 -комплексов выявляет существенный разброс в величинах, что свидетельствует о значительном влиянии окружения на параметры координационной связи. Для анализа механизма образования связи $N3-Ag^+-N3$ мы провели расчет профиля изменения свободной энергии процесса диссоциации пар цитозинов, опосредованных ионом серебра, в реальном водном окружении с использованием комбинированной методики молекулярной механики и квантовой химии и выявили новые детали этих процессов, уточняющие предыдущие модельные представления.

Методы и модели

Для расчета профиля изменения свободной энергии процесса диссоциации двух цитозинов в комплексе с ионом серебра использовалась комбинированная схема квантовой механики и молекулярной механики (КМ/ММ), реализованная в программе CP2K [Hutter et al., 2014]. В качестве модели цитозинов рассматривались цитидины, включающие азотистые основания и остаток рибозы без фосфатов. Комбинированная схема позволила разделить систему на квантовую часть (КМ), где происходила непосредственно реакция с участием серебра в рамках теории функционала плотности (ТФП), и молекулярно-механическую (ММ), которая оказывала влияние посредством валентного и электростатического взаимодействия на квантовую часть со стороны рибозы нуклеотидов и водного растворителя. Для процесса диссоциации проводилась молекулярная динамика с наложением силы, действующей на центр масс одного цитозина. Расчет молекулярной динамики с наложением силы в КМ/ММ проводился с шагом интегрирования 0.5 фс в NVT ансамбле со смещением от 4.2 Å до 9 Å между N3 атомами цитозинов со скоростью 0.005 Å/фс. Затем из траектории вырезались фреймы с шагом 0.1 Å, для каждого фрейма проводилась ограниченная КМ/ММ МД длиной в 2 пс с фиксированием коллективной переменной (расстояние между N3 атомами) с помощью алгоритма SHAKE [Ciccotti et al., 1989]. В результате этих расчетов с использованием алгоритма SHAKE в каждом окне траектории с шагом в 0.1 Å были получены множители Лагранжа и построены профили изменения свободной энергии как зависимость потенциала средней силы от расстояния между атомами N3. КМ/ММ-интерфейс использовал аддитивный гамильтониан для двух систем, КМ и ММ, сопряженных через линкерные атомы Н. Невалентные взаимодействия между КМ и ММ частями системы описывались только электростатическими потенциалами с помощью метода гауссова разложения (GEEP) [Laino et al., 2005]. Квантовая часть системы, включающая ионы серебра и азотистые основания цитидинов, описывалась в рамках теории функционала плотности (ТФП) с использованием GGA функционала PBE [Perdew et al., 1996] с поправкой Гримма [Grimme, 2012] на дисперсионные взаимодействия в плосковолновом представлении (GPW),

волновом базисе DZVP [VandeVondele, Hutter, 2007] для электронов органических атомов и валентных электронов серебра с использованием для остовных электронов серебра псевдопотенциала GTN [Goedecker et al., 1996; Hartwigsen et al., 1998; Krack, 2005]. Молекулярно-механическая часть системы, включающая остатки рибозы и молекулы растворителя, описывались параметрами силового поля AmberBSC1 [Ivani et al., 2015], доработанного для нуклеиновых кислот. Предложенный уровень теории функционала плотности и комбинированной схемы КМ/ММ уже использовался ранее для металлоорганических систем [Burgess et al., 2015; Espinosa Leal et al., 2015; Ramazanov et al., 2016; Reveguk et al., 2018; Volkov et al., 2018]. Для анализа невалентных взаимодействий ионов серебра и цитозинов рассчитывались дескрипторы NCI в программе NCIPLLOT [Contreras-García et al., 2011].

Результаты

Полученные профили изменения свободной энергии в процессе диссоциации транс- и цис-изомеров комплексов C–Ag⁺–C выявили закономерности, которые несколько отличаются от ранее полученных данных в чистых квантово-химических исследованиях равновесных конфигураций [Espinosa Leal, Lopez-Acevedo, 2015; Fortino et al., 2015]. Для обоих изомеров мы наблюдали наличие двух минимумов по энергии на профиле, предшествующих переходному состоянию диссоциации, которые можно обозначить как локальный и глобальный минимумы (рис. 2).

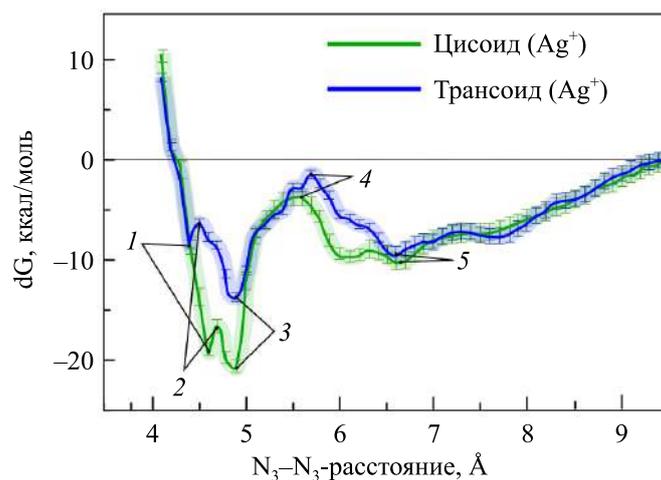


Рис. 2. Профили изменения свободной энергии в процессе диссоциации цис- и транс-конфигурации комплексов цитидинов с ионами серебра. Статистическая ошибка расчета потенциала средней силы изображена с помощью черточек

Для ключевых точек на профилях были рассчитаны дескрипторы невалентных взаимодействий (рис. 3). Транс-конфигурация (трансоид) имеет два минимума на расстоянии 4.4 Å и 4.9 Å с энергиями –8.51 ккал/моль и –13.67 ккал/моль, в то время как цис-конфигурация (цисоид) имеет два минимума на расстоянии 4.5 Å и 4.9 Å с энергиями –18.1 и –20.62 ккал/моль. Расчеты диссоциации канонических пар гуанин–цитозин и аденин–урацил с использованием классических силовых полей и метода молекулярной динамики в явном растворителе предсказывают значения свободной энергии для глобального минимума соответственно –5.53 ккал/моль и –4.42 ккал/моль, что в несколько раз меньше, чем полученные значения для цитозинов, опосредованных ионами серебра [Vendeix et al., 2009]. Две пары цитозинов без ионов серебра в кислой среде также могут образовать комплекс посредством иона H⁺ с предсказуемой величиной свободной энергии диссоциации, не превосходящей 6 ккал/моль. Сравнение показывает, что добавление ионов серебра в структуру цитозиновых нарушений должно существенно стабилизировать комплекс, что согласуется с результатами экспериментов по плавлению [Swasey, Gwinn,

2016; Torigoe et al., 2012]. Надо отметить, что многие теоретические расчеты равновесных конфигураций цис- и транс-изомеров комплексов $C-Ag^+-C$ определяют расстояние N3–N3 в пределах 4.2–4.5 Å в зависимости от использованного метода. В исследованиях ЯМР и кристаллографии этот параметр варьируется в диапазоне 4.24–4.72 Å (таблица 1).

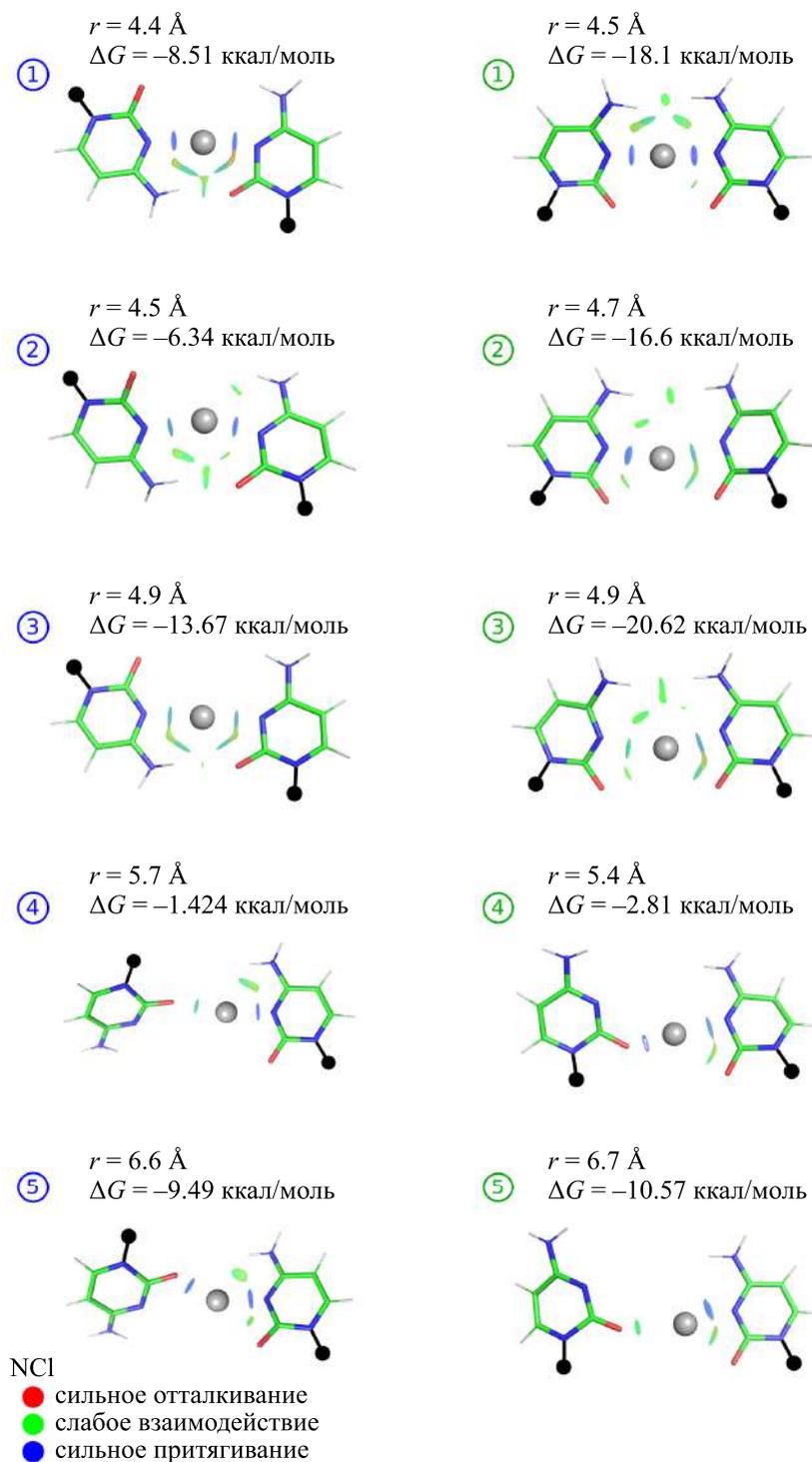


Рис. 3. Иллюстрация геометрий ключевых точек профилей изменения свободной энергии в процессе диссоциации. Рибозные остатки не показаны

Таблица 1. Параметры длин связи N3–N3 в комплексах C–Ag⁺–C, полученные в различных экспериментах ЯМР и PCA

PDB ID	Цисоид (Ag ⁺), Å	Трансоид (Ag ⁺), Å
2RVP (ЯМР)	4.405 ± 0.025	–
5AY2 (PCA)	4.55, 4.32, 4.35, 4.35	–
5IX7 (PCA)	4.72, 4.36	–
5XJZ (PCA)	4.25	–
6NIZ (PCA)	–	4.24, 4.29, 4.24

Очевидно, что в реальной структуре локальная геометрия связи N3–Ag⁺–N3 должна зависеть от полимерного окружения, которое влияет на свойства иона серебра координировать неподделенные пары атомов азотов и кислородов. Точка 2 на профилях (рис. 2) для обоих изомеров относится к второстепенному барьеру, не превышающему 3 ккал/моль, пока они не попадают в глобальный минимум энергии. В случае цисоида переходное состояние соответствует четырем «слабым» координационным связям с экзациклической карбонильной группой и аминогруппой обоих цитозинов, обладает плоской геометрией, в то время как трансоид характеризуется небольшим вращением вокруг оси вдоль линии связи N3–Ag⁺–N3. Следующая точка 3 соответствует глобальному минимуму с разностью энергий порядка 7 ккал/моль для изомеров, где цисоид лежит ниже, чем трансоид на профиле. Это происходит из-за небольшого вращения в трансоиде, приводящего к появлению трех «слабых» связей по сравнению с двумя «сильными» и одной «слабой» связями в цисоиде. Следующие две точки 4 и 5 для обоих изомеров предполагают продолжающуюся диссоциацию путем создания «сильных» и «слабых» электростатических взаимодействий посредством вращения одного из цитозинов.

Заключение

Проведенные расчеты профилей изменения свободной энергии диссоциации пар цитозинов в разной конформации, опосредованных ионами серебра, показали, что при связывании с ионами серебра цитозины существенно стабилизируются в сравнении с каноническими парами гуанин-цитозин и аденин-урацил. В транс- и цис-конфигурации C–Ag⁺–C свободные энергии составляют –13.67 ккал/моль и –20.62 ккал/моль, что в несколько раз превосходит свободную энергию образования канонических уотсон-криковских пар. С использованием комбинированной схемы КМ/ММ для расчета профиля свободной энергии диссоциации было выявлено, что относительно одной изолированной пары цитозинов транс-конфигурация обладает меньшей выгодностью по энергии, чем цис-конфигурация, что противоречит предыдущим чисто квантово-механическим расчетам, где было показано, что эти комплексы в условиях неявно заданного растворителя изоэнергетичны по отношению к диссоциации. С одной стороны, расчетное преимущество изолированной цис-конфигурации C–Ag⁺–C не объясняет наблюдаемое в экспериментах образование транс-конфигураций в случае гибридизации некомплементарных или частично некомплементарных нитей с цитозиновыми включениями, а с другой стороны, может свидетельствовать о более сложной картине диссоциации, когда речь идет о протяженной ДНК. В профилях диссоциации были обнаружены глобальные минимумы, которые, вероятно, при учете полимерного окружения могут поменять свою геометрию и характер образования. По-видимому, модель стабилизации ионами серебра дуплекса ДНК в случае гибридизации некомплементарных или частично некомплементарных нитей с цитозиновыми включениями должна учитывать не только непосредственное связывание ионов серебра с цитозинами, но и наличие сопутствующих факторов, таких как стэкинг-взаимодействие в протяженной ДНК, межплоскостные водородные связи, а также металлофильное взаимодействие соседних ионов серебра. Исследование более протяженных структур с наличием нескольких C–Ag⁺–C пар нуклеотидов позволит ответить на вопросы, касающиеся механизмов сборки ДНК-структур в комплексе с ионами серебра.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-73-10070) с использованием вычислительного ресурсного центра СПбГУ и суперкомпьютерного комплекса МГУ «Ломоносов».

Список литературы (References)

- Burgess J. A. J. et al.* Magnetic fingerprint of individual Fe₄ molecular magnets under compression by a scanning tunnelling microscope // *Nat. Commun.* — 2015. — Vol. 6, No. 1. — P. 8216.
- Ciccotti G. et al.* Constrained molecular dynamics and the mean potential for an ion pair in a polar solvent // *Chem. Phys.* — 1989. — Vol. 129, No. 2. — P. 241–251.
- Clever G. H., Kaul C., Carell T.* DNA-metal base pairs // *Angew. Chemie — Int. Ed.* — 2007. — Vol. 46, No. 33. — P. 6226–6236.
- Clever G. H., Shionoya M.* Alternative DNA base pairing through metal coordination // *Met. Ions Life Sci.* — 2012. — Vol. 10. — P. 269–294.
- Contreras-García J. et al.* NCIPLOT: A Program for Plotting Noncovalent Interaction Regions // *J. Chem. Theory Comput.* — 2011. — Vol. 7, No. 3. — P. 625–632.
- Dairaku T. et al.* HgII/AgI-mediated base pairs and their NMR spectroscopic studies // *Inorganica Chim. Acta.* — 2016a. — Vol. 452. — P. 34–42.
- Dairaku T. et al.* Structure Determination of an Ag^I — Mediated Cytosine-Cytosine Base Pair within DNA Duplex in Solution with ¹H/¹⁵N/¹⁰⁹Ag NMR Spectroscopy // *Chem. — A Eur. J.* — 2016b. — Vol. 22, No. 37. — P. 13028–13031.
- Day H. A., Huguin C., Waller Z. A. E.* Silver cations fold i-motif at neutral pH // *Chem. Commun.* — 2013. — Vol. 49, No. 70. — P. 7696–7698.
- Espinosa Leal L. A. et al.* The Role of Hydrogen Bonds in the Stabilization of Silver-Mediated Cytosine Tetramers // *J. Phys. Chem. Lett.* — 2015. — Vol. 6, No. 20. — P. 4061–4066.
- Espinosa Leal L. A., Lopez-Acevedo O.* On the interaction between gold and silver metal atoms and DNA/RNA nucleobases — A comprehensive computational study of ground state properties // *Nanotechnol. Rev.* — 2015. — Vol. 4, No. 2. — P. 173–191.
- Fortino M., Marino T., Russo N.* Theoretical study of silver-ion-mediated base pairs: The case of C-Ag-C and C-Ag-A systems // *J. Phys. Chem. A.* — 2015. — Vol. 119, No. 21. — P. 5153–5157.
- Goedecker S., Teter M., Hutter J.* Separable dual-space Gaussian pseudopotentials // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54, No. 3. — P. 1703–1710.
- Grimme S.* Supramolecular binding thermodynamics by dispersion-corrected density functional theory // *Chem. — A Eur. J.* — 2012. — Vol. 18, No. 32. — P. 9955–9964.
- Guo W. et al.* Reversible Ag⁺-crosslinked DNA hydrogels // *Chem. Commun.* — 2014. — Vol. 50, No. 31. — P. 4065–4068.
- Hartwigsen C., Goedecker S., Hutter J.* Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 58, No. 7. — P. 3641–3662.
- Houlton A. et al.* Addressing the Properties of “Metallo-DNA” with a Ag(I)-Mediated Supramolecular Duplex // *Chem. Sci.* — 2019.
- Huard D. J. E. et al.* Atomic Structure of a Fluorescent Ag₈ Cluster Templated by a Multistranded DNA Scaffold // *J. Am. Chem. Soc.* — 2019. — C. jacs.8b12203.
- Hutter J. et al.* Cp2k: Atomistic simulations of condensed matter systems // *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* — 2014. — Vol. 4, No. 1. — P. 15–25.
- Ivani I. et al.* Parmbsc1: A refined force field for DNA simulations // *Nat. Methods.* — 2015. — Vol. 13, No. 1. — P. 55–58.

- Jash B., Müller J.* Application of a Metal-Mediated Base Pair to the Detection of Medicinally Relevant Single Nucleotide Polymorphisms // *Eur. J. Inorg. Chem.* — 2017a. — Vol. 2017, No. 33. — P. 3856.
- Jash B., Müller J.* Metal-Mediated Base Pairs: From Characterization to Application // *Chem. — A Eur. J.* — 2017b. — Vol. 23, No. 68. — P. 17166–17178.
- Kondo J. et al.* High-Resolution Crystal Structure of a Silver(I)-RNA Hybrid Duplex Containing Watson-Crick-like C-Silver(I)-C Metallo-Base Pairs. // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* — 2015. — Vol. 54, No. 45. — P. 13323–6.
- Kondo J. et al.* A metallo-DNA nanowire with uninterrupted one-dimensional silver array // *Nat. Chem.* — 2017. — Vol. 9, No. 10. — P. 956–960.
- Krack M.* Pseudopotentials for H to Kr optimized for gradient-corrected exchange-correlation functionals // *Theor. Chem. Acc.* — 2005. — Vol. 114, No. 1–3. — P. 145–152.
- Laino T. et al.* An efficient real space multigrid QM/MM electrostatic coupling // *J. Chem. Theory Comput.* — 2005. — Vol. 1, No. 6. — P. 1176–1184.
- Megger D. A. et al.* Contiguous metal-mediated base pairs comprising two Ag^I ions // *Chem. — A Eur. J.* — 2011. — Vol. 17, No. 23. — P. 6533–6544.
- Müller J.* Metal-mediated base pairs in parallel-stranded DNA // *Beilstein J. Org. Chem.* — 2017. — Vol. 13. — P. 2671–2681.
- Ono T. et al.* Synthesis of covalently linked parallel and antiparallel DNA duplexes containing the metal-mediated base pairs T-Hg(II)-T and C-Ag(I)-C // *Chem. Commun.* — 2011. — Vol. 47, No. 5. — P. 1542–1544.
- Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 77, No. 18. — P. 3865–3868.
- Ramazanov R. R. et al.* Ag-DNA Emitter: Metal Nanorod or Supramolecular Complex? // *J. Phys. Chem. Lett.* — 2016. — Vol. 7, No. 18. — P. 3560–3566.
- Reveguk Z. et al.* Ultrafast fluorescence dynamics of DNA-based silver clusters // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2018. — Vol. 20, No. 44. — P. 28205–28210.
- Swasey S. M. et al.* Parallel G-duplex and C-duplex DNA with Uninterrupted Spines of Ag^I — Mediated Base Pairs // *J. Phys. Chem. Lett.* — 2018. — P. 1–43.
- Swasey S. M., Gwinn E. G.* Silver-mediated base pairings: Towards dynamic DNA nanostructures with enhanced chemical and thermal stability // *New J. Phys.* — 2016. — Vol. 18, No. 4. — P. 1–14.
- Tanaka Y. et al.* Structures, physicochemical properties, and applications of T-Hg(II)-T, C-Ag(I)-C, and other metallo-base-pairs // *Chem. Commun.* — 2015. — Vol. 51, No. 98. — P. 17343–17360.
- Torigoe H. et al.* Thermodynamic and structural properties of the specific binding between Ag⁺ ion and C:C mismatched base pair in duplex DNA to form C-Ag-C metal-mediated base pair // *Biochimie.* — 2012. — Vol. 94. — P. 2431–2440.
- VandeVondele J., Hutter J.* Gaussian basis sets for accurate calculations on molecular systems in gas and condensed phases // *J. Chem. Phys.* — 2007. — Vol. 127, No. 11. — P. 114105.
- Vendeix F. A. P., Munoz A. M., Agris P. F.* Free energy calculation of modified base-pair formation in explicit solvent: A predictive model // 2009. — P. 2278–2287.
- Volkov I. L. et al.* DNA as UV light-harvesting antenna // *Nucleic Acids Res.* — 2018. — Vol. 46, No. 7. — P. 3543–3551.