

Estructura electrónica de análogos sintéticos de las bases nitrogenadas del ADN

Fusari, Corina M.¹; Sferco, Silvano J.^{1,2}

1- Departamento de Física. Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas. Universidad Nacional del Litoral. Casilla de Correo 242, (3000) Santa Fe, Argentina.

2- INTEC (UNL – CONICET), Güemes 3450, (3000) Santa Fe, Argentina. e-mail: corina_fusari@hotmail.com

RESUMEN: Se estudiaron mediante cálculos cuánticos semiempíricos los pares de bases del ADN formados por las bases naturales y por análogos sintéticos de la adenina (Z) y timina (F). Estas moléculas sintéticas, en los procesos de replicación, sustituyen a las naturales replicando perfectamente el ADN. Se obtuvieron gráficos de densidad de carga y potencial electrostático que permiten comprender la formación de los enlaces de hidrógeno necesarios para la estabilidad de las bases apareadas. Se estudiaron los pares A-T, A-F, Z-T y Z-F a los efectos de determinar las interacciones del apareamiento. Nuestros resultados indican que, para la replicación del ADN, es de mayor importancia la complementariedad estructural (el efecto estérico), que los posibles enlaces de hidrógeno formados entre pares cuando incluyen algún análogo sintético.

Palabras Claves: Bases de ADN – análogos sintéticos – adenina – timina.

SUMMARY: Electronic Structure of Synthetic Analogous of DNA Bases. Fusari, Corina M. ¹; Sferco, Silvano J.^{1,2}. Semiempirical quantum mechanics calculations for the natural base pairs of DNA, and pairs containing structural analogous to adenine (Z) and thymine (F) are presented. The synthetic molecules substitute the natural bases with no consequences in the double strand elongation and stabilization when the DNA's replication process takes place. We show total charge density and electrostatic potential plots in two and three dimensions that help to understand the hydrogen bond formation necessary for the stability of the base pair. We study the base pairs A-T, A-F, Z-T and Z-F to determine the base-pairing interactions. Our results indicate that the shape matching between bases (steric effect) is more important for the replication than the ability to form hydrogen bonds when the base pair include a synthetic analogue.

Key Words: DNA basis – synthetic analogues – adenine – thymine.