

Eldonanto: Internacia Scienca Asocio Esperantista (ISAE)

Ĉefredaktoro: RNDr. Josef Kavka, CSc., Lužná 7, CS-160 00 Praha 6 — Vokovice, Ĉeĥosl.

Redaktoro de la tehnikaj kajeroj: Inĝ. Jan Werner, Kroftova 84, CS-616 Brno, Ĉeĥoslovakio

Grafika redaktoro: Brunetto Casini, Edistudio, cas. post. 213, I-56100 Pisa, Italujo

Administranto por la pagipovaj landoj: Brunetto Casini, pĉk 12230561, Edistudio, Italujo

Administranto por la nepagipovaj landoj: Dr. Václav Hník, CSc., Fakulta architektury ČVUT, Thákurova 7 — CS-166 34 Praha 6 — Dejvice, Ĉeĥoslovakio

Kompostis: Composit, via Giordano Bruno 8, I-56100 Pisa, Italujo

Enpaĝigis: Edistudio, c.p. 213, I-56100 Pisa, Italujo

Presis: Offset Vallerini, Pisa, Italujo

Reguloj por la aŭtoroj.

1. Verki laŭeble pri sia propra originala esplorado tiel, ke ĝin komprenu eĉ alifakaj sciencistoj;
2. Sendi al mi la tekston en 2 ekzempleroj, klare tajpitaj sur maldika papero;
3. Maŝinskribi normallitere en la tajp-areo de 165 mm × 250 mm, kun la liniado 1¹/₂, t.e. kun 40 linioj surpaĝe;
4. Ĉiun vorton neesperantan substreki ondlinje (por la kursiva komposto), dum rektlinia substreko signifas komposton dikliteran;
5. En la teksto noti lokojn, kie troviĝu eventualaj figuroj;
6. Ne forgesi referenc-liston;
7. Aldoni koncizan resumon en sia gepatra lingvo.

Estraro de ISAE:

Prezidanto: Prof. D-ro Carl Stöp-Bowitz, Camilla Colletts vei 3, N- Oslo 2, Norvegio

Vicprezidantoj: Prof. Sin'itirō Kawamura, 424-7 Kinasyō Huzii, Takamatu, 760, Japanio

Prof. Vasil Peevski D-ro hc., Gogol 9, BG-1504 Sofia, Bulgario

Ĝenerala sekretario: Christian Darbellay, inĝeniero, Jostenallee 45, D-4040 Neuss 1, FRG

Sekretario-kasisto: Prof. Paul E. Kustaanheimo, Danmarks Tekniske Højskole, 040 DIA-E, DK-2800 Lyngby, Danlando

Aliaj estraranoj: S-ro Rüdiger Eichholz, direktoro de TC-ISAE, R.R.I, Bailieboro, Ontario, KOL 1B0, Kanado

D-ro W.A. Verloren Van Themaat, direktoro de IC-ISAE, Volkerakstraat 38^l, NL-1079 XT Amsterdam, Nederlando

D-ro Josef Kavka CSc.

S-ro Bruĉjo Kasini, cas. post. 213, I-56100 Pisa, Italujo

D-ro Václav Hník CSc., Podjavorinské 1609/6, CS-149 00 Praha 4 — Chodov, Ĉeĥoslovakio

D-ro Gerhard Kalckhoff, Schuckertstraße 14/X^l, D-8000 München 70, F.R. Germanio

Formulo de la nativa DNA

M. T. Popov (Sovetio)*

En 1953 Crick kaj Watson laŭ rentgenogramoj, ricevataj de Wilkins kaj Franklin, konstruis modelon de la desoksiribonukleata acido (DNA). DNA aperis antaŭ biologoj en aspekto de spirala ŝtupetaro, kies ŝtupetojn formas paroj de purinaj kaj pirimidinaj azotaj bazoj adenino-timino (A-T) kaj guanino-citozino (G-C). La bazoj en ĉiu paro estas ligitaj per hidrogenaj ligoj; per siaj eksteraj nitrogenaj atomoj la bazoj estas kroĉitaj al desoksiribozoj de spirala suker-fosfataj polimeroj. La molekulo havis du suker-fosfatajn spiralojn; la desoksiribozoj en ili estas orientitaj malsamdirekte. Konforme al tiu modelo estas skribita formulo de DNA (1).

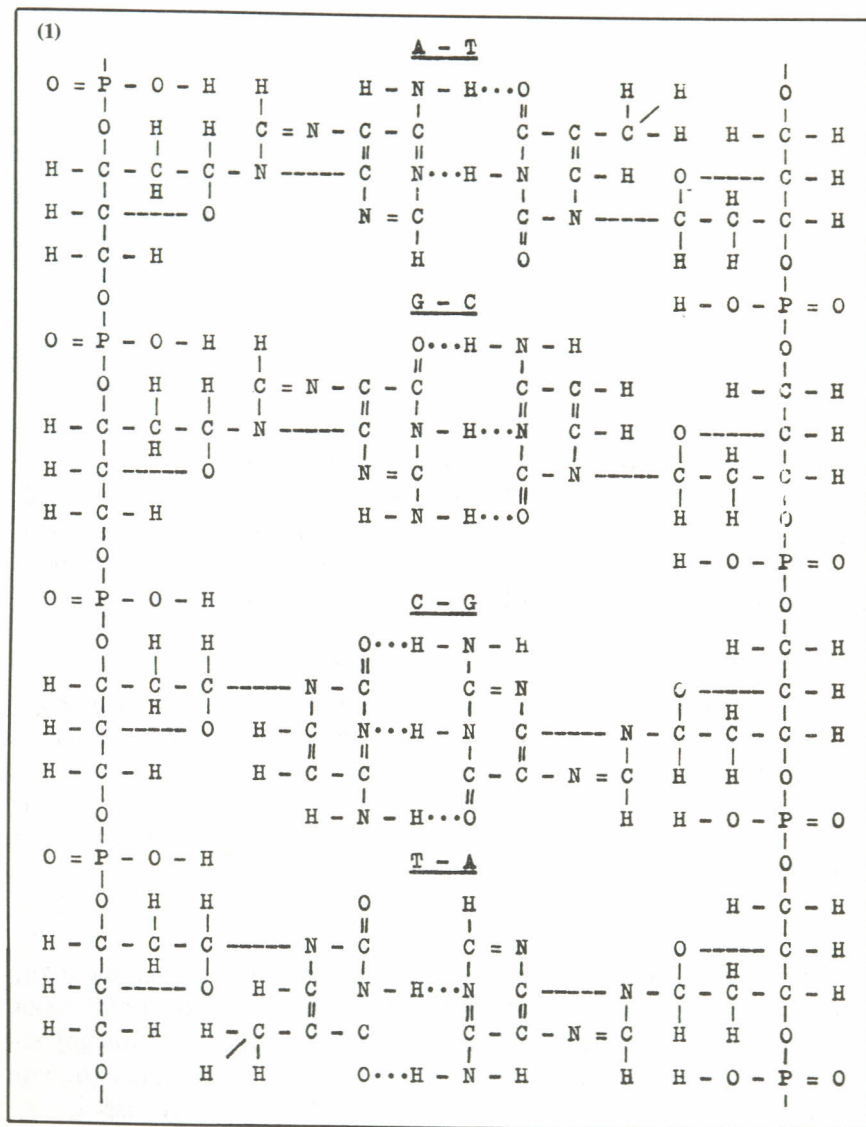
Kiun DNA prezentas la modelo kaj konforma al ĝi formulo?

Por esplori fizikajn-hemiajn ecojn kaj strukturon de DNA oni eligas ĝin el histo per «barbaraj» metodoj: oni dispecigas kaj dispistas la histon, agas per multaj reagentoj, ŝanĝas temperaturon kaj disdividas en centrifugiloj per grandegaj akceloj dekmiloble pli grandaj ol gravitakcelo. DNA, ricevita tia-maniere, konservas vitalecon, sed estas tre dube, ke ĝi restas la sama, kia ĝi estis en citoplasmo aŭ tiom pli en ĥromosomoj.

Kia do estas la nativa DNA? Nativa en strikta senco de la vorto, t.e. en senco «denaska», sed ne en senco «vivkapabla».

La aparatoj kaj metodoj, uzataj de bioĥemiistoj kaj molekularaj biologoj, ne donas eblecon «palpi» DNA en ĥromosomoj. Ni ne povas vidi vivan DNA; ĉu tio signifas ke ni ne povas pentri ĝian portreton? Paleontologoj neniam vidis dinosaŭrojn, sed ja scias, kiel tiuj aspektis. Leĝecoj, malkovritaj de la aŭtoro, permesas «laŭ ostoj» restarigi aspekton de la viva DNA.

* kandidato de fizik-matematikaj sciencoj, docento de fiziko en Pedagogia Instituto, Melitopol'ska 4-12, SU-332440 BERDJANSK



En 1977 mi malkovris komplementecon de ŝargaĵo de elektronaj tavoloj en la ĉefaj bazoparoj de DNA, kiu konsistas en tio, ke ŝargaĵoj de elektronaj tavoloj (subŝeloj) en la paroj A-T kaj G-C estas egalaj — ĉiu paro havas 38

(2)

adenino timino H guanino citozino

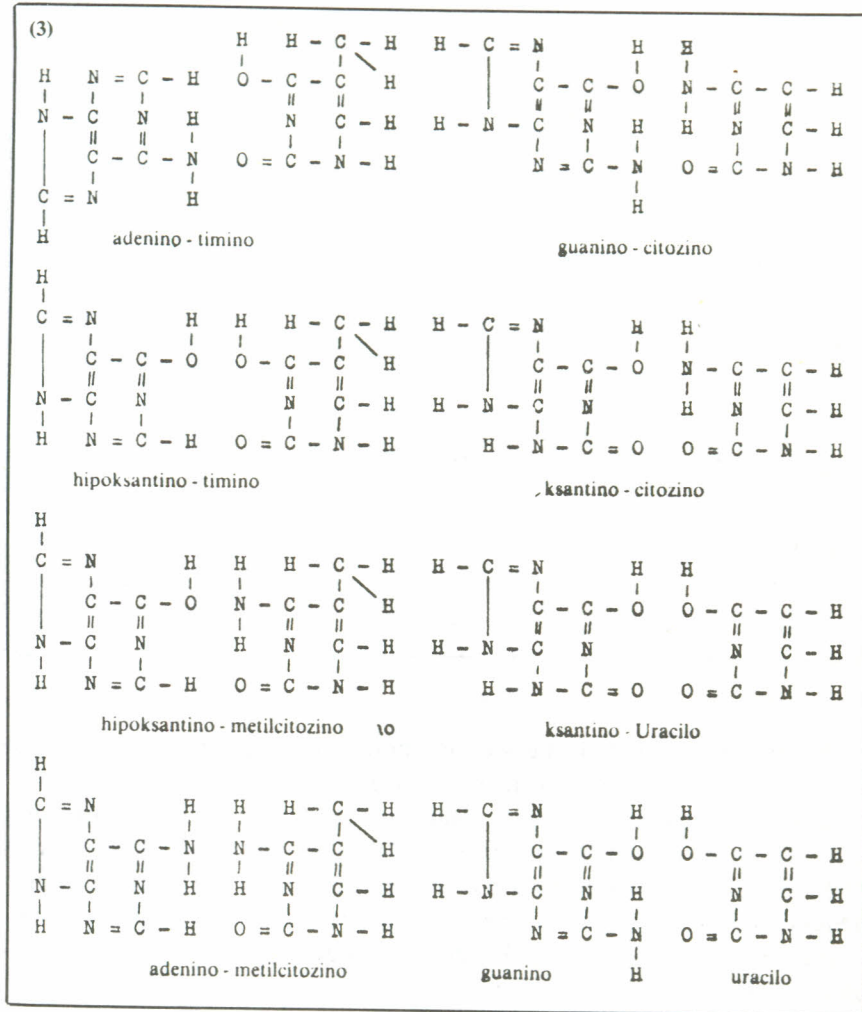
bazoj	C	C	O	H	n	q'	q''	q
adenino	5	5	—	5	15	20	50	70
timino	5	2	2	6	15	18	48	66
sumo	10	7	2	11	30	38	98	136
guanino	5	5	1	5	16	22	56	78
citozino	4	3	1	5	13	16	42	58
sumo	9	8	2	10	29	38	98	136

internajn elektronojn kaj 98 eksterajn, dum en apartaj bazoj, la nombroj de elektronoj en la tavoloj estas malsamaj (2).

La komplementeco de ŝargaĵo aparte en la internaj kaj eksteraj tavoloj aludas tion, ke paro de azotaj bazoj en DNA-polinukleotido formas komplekson, kiun oni devas konsideri unu molekulo, sed ne du, ligitaj per hidrogenaj ligiloj. Krome la fakto de komplementeco de elektra ŝargaĵo en internaj tavoloj devigas supozi, ke en vivprocesoj partoprenas ankaŭ 1s-elektronoj de karbono, nitrogeno kaj oksigeno.

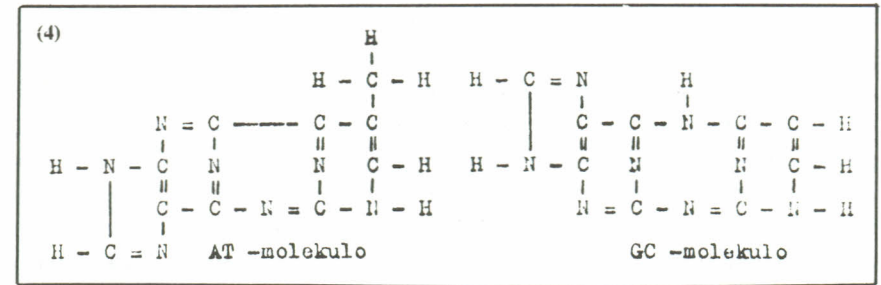
Konataj estas bazoj, ne kutimaj por natura DNA — ksantino, hipoksantino, uracilo kaj metilcitozino, kiuj unuigante kun A,G,T,C, aŭ inter si povus formi parojn kun la sama suma nombro de elektronoj en la tavoloj kiel paroj A-T kaj G-C. Povus formi, sed ne formas.

Estis rimarkite, ke el ĉiuj paroj de la suprenomitaĵaj bazoj, kiuj plenumas la kondiĉon de ŝargaĵkomplementeco, nur paroj A-T kaj G-C havas ĉe la dua kaj sesa atomoj de iliaj sesmembraj heterocikloj atomojn aŭ funkciajn gru-



poj, kiuj povas krei du kovalentajn ligilojn formante interbazan senoksigenan heterociklon (3).

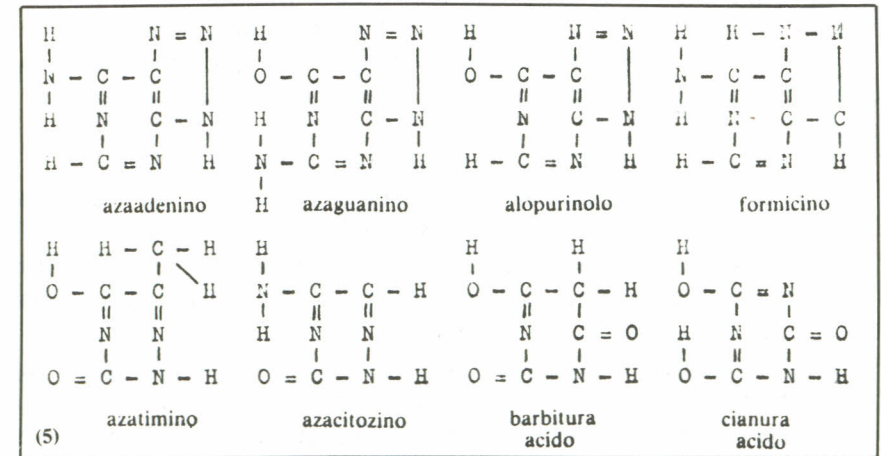
El tiu fakto sekvas konkludo, ke adenino kun timino kaj guanino kun citozino dum formado de DNA-polinukleotido interligiĝas tiel, ke post elimino de du akvomolekuloj ĉiu paro formas unu pirimidin-purinan molekulon,



en kiu primaraj heterocikloj estasigitaj per interna granda heterociklo ne enhavanta oksigenon (4).

Kaj tio signifas, ke la modelo de *Watson-Crick* prezentas parte denaturigitan DNA, en kiu internaj heterocikloj estas hidrolize splitigitaj, sed ne natiĝan ĝian formon. La nativa DNA konsistas el du suker-fosfataj ĉenoj, ligitaj transverse per pirimidin-purinaj molekuloj (pp-molekuloj).

Por ekscii la manieron de alkroĉo de pirimidin-purinaj molekuloj al suker-fosfataj ĉenoj estis selektitaj bazaj analogoj, kiuj povus komplementi la bazojn laŭ ŝargaĵo de elektronaĵo, sed kiuj ne eniĝas en DNA. Al tiaj analogoj apartenas azapurinoj, azapirimidinoj, alopurinolo, formicino, cianura kaj barbitura acidoj (5).



El komparo de ĉi kombinaĵoj kun ĉefaj bazoj iĝas videble, ke en naturan

DNA eniras nur bazoj, kapablaj kunligiĝi per senoksigena heterociklo, kiuj povas formi C-C glikozidan ligilon kun desoksiriboza de suker-fosfataj ĉenoj. Neniu purino prezentita en (5) povas formi tiun ligilon per sia 8-atomo kaj neniu pirimidino — per sia 4-atomo (numerado laŭ *Fischer*). La purinoj, prezentitaj en (5), havas N-atomon sur 9-loko (krom formicino) kaj ĉiuj pirimidinoj havas N-atomon sur 3-loko. Do, se ili formus C-N glikozidajn ligilojn, ili devus eniri en la nativan DNA, ĉar laŭ komplementeco de ŝargaĵo kaj laŭ kapablo formi internan heterociklon ili plene konvenas. La komparo de la formuloj (5) kun formuloj de ĉefaj bazoj de DNA devigas konkludi, ke en la nativa DNA azotaj bazoj estas ligitaj al desoksiribozoj ne per nitrogena atomo, sed per la karbona (la 4-a en pirimidinoj kaj la 8-a en purinoj).

Tiel estas deduktita la formulo de la nativa DNA (6).

La plej serioza argumento kontraŭ tia DNA estas tiu, ke kovalentaj interbazaj ligiloj estas dekoble-tridekoble pli firmaj ol la hidrogenaj kaj pro tio estas bezonata pli granda energio por distranĉi DNA laŭlonge. Seriozeco de tiu argumento estas nur ŝajna.

La unua etapo de la distranĉo estas transformo de pp-molekuloj, kroĉitaj al suker-fosfata karkaso per la ligiloj C-C en pp-parojn kies bazoj estas interligitaj per la H-ligiloj kaj kroĉitaj al la karkaso per la ligiloj C-N. Por ekscii, ĉu tiu kuniĝo estas endoerga aŭ ekzoerga, necesas kalkuli tutan ligenergion de la pp-molekulo, subtrahi energion de ĝia tensio, aldoni ligenergion de du akvomolekuloj, kiuj aperas dum hidrolizo, kaj kompari tiun sumon kun tuta ligenergio de la pp-paro. Se la sumo (E_1) estas pli granda ol la ligenergio de la paro (E_2), tiam la transformo estas endoerga, se male — ekzoerga.

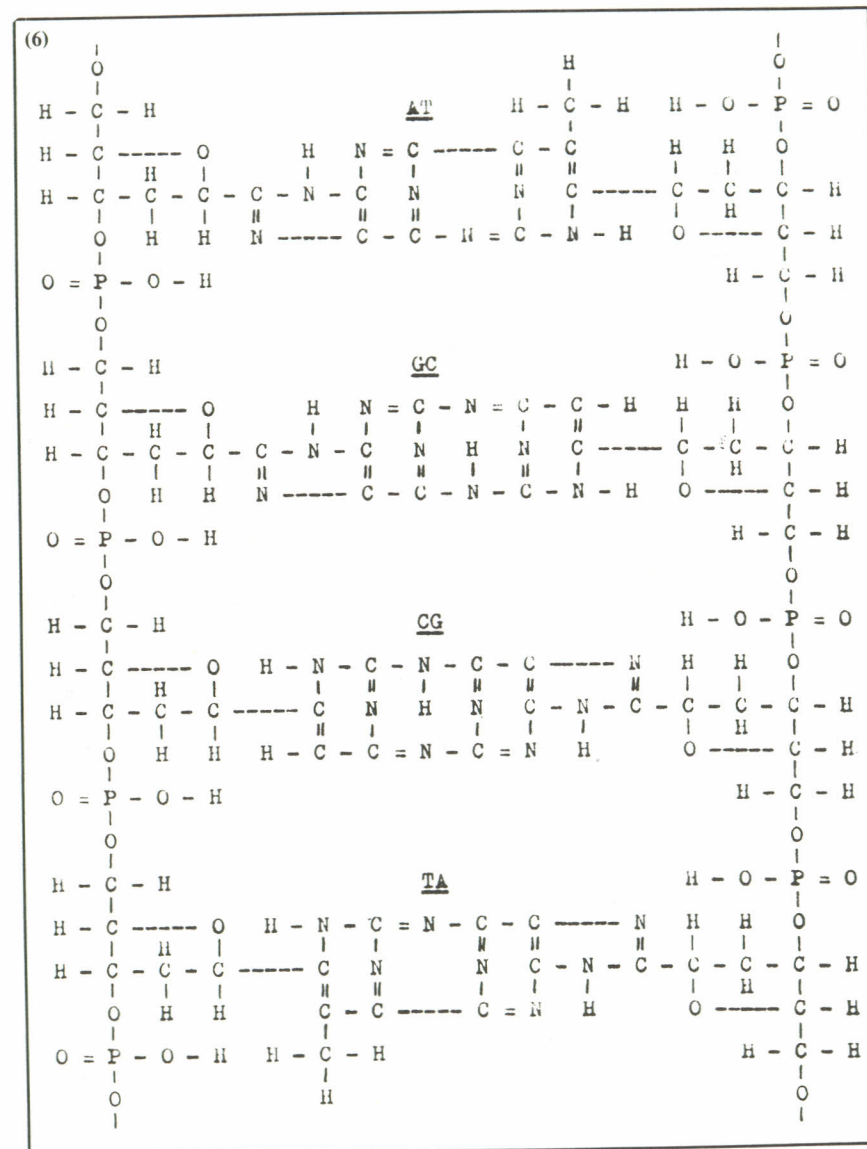
Por taksii energion de la tensio necesas havi modelon de DNA.

La aŭtoro konstruis modelon konforman al formulo (6). La konstruita DNA o evidentiĝis ne spirala sed rubandforma (1978, 1979 ab).

Tiu modelo estas unu el la kelkaj, kiujn eblas konstrui laŭ la formulo (6). Ni rimarku ĉi tie ke laŭ modelo eblas skribi nur unu formulon sed laŭ formulo povas esti konstruitaj pli ol unu modelo.

La tensienergio, kiun mi kalkulis laŭ donitaĵoj prenitaj el *Eliel* (1962) kaj el aliaj fontoj, egalas ĉirkaŭ 60 kJ/mol, ĝi estas proksimume la sama por ambaŭ pp-molekuloj. La valoroj de ligenergioj prezentitaj en (7) devenas el *L.* kaj *P. Pauling* (1972), la energivaloron de la H-ligiloj ni prenu 24 kJ/mol el *Watson* (1976). Ligenergio de atomoj en du akvo molekuloj, kalkulita kiel

energio de kvar ligiloj O-H, egalas 1852 kJ/mol. La formuloj kaj la energioj de ĉiuj ligiloj en AT-molekulo kaj en At-paroj estas prezentitaj en (8), la sa-



(7) Ligenergioj (kJ/mol)

C - N	292	N - H	391	C = C	615
C - C	344	C - H	415	C = N	615
C - O	350	O - H	463	C = O	725

mo por GC — en (9).

(8)

	C=O	2	1230
	C-C	6	2064
	C=N	5	3075
	C-N	9	2628
	C-H	3	1245
	N-H	2	782
		27	11024
	C=C	2	1230
	C-C	3	1032
	C=N	3	1845
	C-N	12	3504
	C-H	6	2490
	C=O	2	1450
	N-H	3	1173
	H	2	48
		33	12772
	C=C	2	1230
	C-C	3	1032
	C=N	4	2460
	C-N	11	3212
	C-H	6	2490
	C=O	1	725
	C-O	1	350
	N-H	2	782
	O-H	1	463
	H	2	48
		33	12792

(9)

	C=C	2	1230
	C-C	4	1376
	C=N	5	3075
	C-N	11	3212
	N-H	3	1173
	C-N	1	415
		26	10481
	C=C	2	1230
	C-C	2	688
	C=N	3	1845
	C-N	13	3796
	C=O	2	1450
	N-H	5	1955
	C-H	3	1245
	H	3	72
		33	12281
	C=C	2	1230
	C-C	2	688
	C=N	4	2460
	C-N	12	3504
	C=O	1	725
	C-O	1	350
	O-H	1	463
	N-H	4	1564
	C-H	3	1245
	H	3	72
		33	12301
	C=C	2	1230
	C-C	2	688
	C=N	5	3075
	C-N	11	3212
	C=O	2	700
	O-H	2	926
	N-H	3	1173
	C-H	3	1245
	H	3	72
		33	12321

Ligenergio de AT-molekulo por ĉiu ĝia taŭtomerio kaj resonanco estas la sama 11024 kJ/mol; por ligenergio de AT-paro ni prenu mezan valoron de ligenergio de du ĝiaj eblaj taŭtomerioj montritaj en (8) $E_2 = 12782$ kJ/mol. Tiam $E_1 = 11024 - 60 + 1852 = 12816$ kJ/mol, $E_1 - E_2 = 12816 - 12782 = 34$ kJ/mol. Do, transformo de AT-molekulo en AT-paron estas endoerga, ĝi postulas 34 kJ/mol de energio.

Ligenergio de GC-molekulo estas ankaŭ la sama por ĉiu ĝia taŭtomerio, kaj resonanco, ĝi egalas 10481 kJ/mol; por ligenergio de GC-paro ni prenu mezan valoron de ligenergio de tri ĝiaj eblaj taŭtomerioj $E_2 = 12301$ kJ/mol. Tiam $E_1 = 10481 - 60 + 1852 = 12273$ kJ/mol, $E_1 - E_2 = 12273 - 12301 = -28$ kJ/mol. Kiel videblas, transformo de GC-molekulo en GC-paron estas ekzoerga; dum ĉi transformo liberiĝas energio 28 kJ/mol. Do, se oni kalkulas energion por du diversaj pp-molekuloj, oni akiras etan valoron de 6 kJ/mol.

Certe ni ne devas forgesi, ke la kalkulo estas nur proksimuma; en ĝi ne estis kalkulitaj energioj de resonancoj en la molekuloj kaj en la paroj, krome ni ne atentis tensienergion interbazan en pp-molekuloj. La lasta verŝajne rekompencas grandparte diferencon de resonancenergioj en la ambaŭ strukturoj, pro tio en la kalkuloj ni povas neglekti tiun diferencon.

Ĉi supraj kalkuloj kaj konsideroj permesas konkludi, ke transformo de pp-molekuloj en pp-parojn ne postulas aŭ preskaŭ ne postulas energion. Do aserto pri neeblo de pp-molekuloj pro iliaj firmaj kovalentaj ligiloj estas sendube erara. Kio koncernas energion de aktivigo de pp-molekulo dum ties hidroliza transformo en pp-paron, pri tio zorgu enzimoj; de energia vidpunkto tiu transformo estas tute ebla.

La deduktita formulo de la nativa DNA prezentas strukturon, kiu ege diferencas de la duondenaturigita DNA kun interbazaj H-ligiloj. Karaktera trajde pp-molekuloj estas neordinara abundo de taŭtomerioj kaj resonancoj. AT-molekulo havas 37 taŭtomeriojn kaj resonancojn, GC-molekulo — 82. Ĉar ĉiuj taŭtomerioj kaj resonancoj de iu pp-molekulo havas la saman ligenergion, dum transiro de hidrogeno en pp-molekulo de unu N-atomo al la alia, ligenergio de la molekulo restas senŝanĝa. La distanco inter proksimaj N-atomoj de najbaraj pp-molekuloj egalas ĉirkaŭ 300 pm, tia distanco ebligas transiron de H-atomoj kaj protonoj al N-atomoj de najbara pp-molekulo. Dum tiu proceso okazas interŝanĝo de energio kaj elektra ŝargaĵo inter najbaraj ĉeneroj de DNA. La distanco ebligas ankaŭ dinamikajn H-ligilojn inter najbaraj pp-molekuloj. Dum ekesto kaj detruo de tiuj ligiloj

la molekuloj ankaŭ interŝanĝas energion. La energio pulsas laŭlonge de DNA. Signalo pri iuj ŝanĝoj en iu-ajna pp-molekulo de la ĉeno disvastiĝas tra la tuta DNA.

Resumante suprediriton, ni povas deklari, ke la nativa DNA havas propran nervan sistemon; ĝi havas internan vivon. Interna vivo de DNA konsistas en senĉesa transŝetado de H-atomoj, protonoj kaj elektronoj inter N-atomoj, kiu kaŭzas senĉesan alternon de taŭtomerioj kaj resonancoj de pirimidin-purinajn molekuloj — DNA vivas.

Referencoj

- Eliel, E.L.* (1962): *Stereochemistry of carbon compounds.*
Pauling, L. — Pauling, P. (1975): *Chemistry.*
Popov, M.T. (1978): Ruband-forma desoksi-ribonukleata acido. — SCIENCA REVUO, 78. Ĉapeko.
Popov, M.T. (1979): Komplementeco de ŝargaĵo de elektronaj tavoloj en paroj de ĉefaj bazoj de DNA. — SCIENCAJ KOMUNIKAĴOJ. Budapeŝto.
Popov, M.T. (1979): Ruband-forma desoksi-ribonukleata acido. MEDICINA INTERNACIA REVUO, vol. 8.
Popov, M.T. (1979): Rubandforma DNA. — SCIENCAJ KOMUNIKAĴOJ. Budapeŝto.
Watson, J.D. (1976): *Molecular biology of the gene.*