

## 23.3. NUCLEIC ACIDS

Table A23.3.1.2. X-ray analyses of B-DNA helices and their complexes with minor-groove-binding drug molecules (cont.)

Year	Reference
1996	(B97) T. J. Boggon, E. L. Hancox, K. E. McAuley-Hecht, B. A. Connolly, W. N. Hunter, T. Brown, R. T. Walker & G. A. Leonard (1996). <i>Nucleic Acids Res.</i> <b>24</b> , 951–961.
	(B98) G. R. Clark, E. J. Gray, S. Neidle, Y.-H. Li & W. Leupin (1996). <i>Biochemistry</i> <b>35</b> , 13745–13752.
	(B99) G. R. Clark, C. J. Squire, E. J. Gray, W. Leupin & S. Neidle (1996). <i>Nucleic Acids Res.</i> <b>24</b> , 4882–4889.
	(B100) C. A. Laughton, F. Tanius, C. M. Nunn, D. W. Boykin, W. D. Wilson & S. Neidle (1996). <i>Biochemistry</i> , <b>35</b> , 5655–5661.
	(B101) J. O. Trent, G. R. Clark, A. Kumar, W. D. Wilson, D. W. Boykin, J. E. Hall, R. R. Tidwell, B. L. Blagburn & S. Neidle (1996). <i>J. Med. Chem.</i> <b>39</b> , 4554–4562.
	(B102) L. Urpi, V. Tereshko, L. Malinina, T. Huynh-Dinh & J. A. Subirana (1996). <i>Nature Struct. Biol.</i> <b>3</b> , 325–328.
	(B103) D. Vlieghe, L. Van Meervelt, A. Dautant, B. Gallois, G. Precigoux & O. Kennard (1996). <i>Science</i> , <b>273</b> , 1702–1705.
	(B104) M. C. Wahl, S. T. Rao & M. Sundaralingam (1996). <i>Biophys. J.</i> <b>70</b> , 2857–2866.
1997	(B105) X. Chen, B. Ramakrishnan & M. Sundaralingam (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>267</b> , 1157–1170.
	(B106) G. R. Clark, D. W. Boykin, A. Czarny & S. Neidle (1997). <i>Nucleic Acids Res.</i> <b>25</b> , 1510–1515.
	(B107) G.-W. Han, M. L. Kopka, D. Cascio, K. Grzeskowiak & R. E. Dickerson (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>269</b> , 811–826.
	(B108) M. L. Kopka, D. S. Goodsell, G. W. Han, T. K. Chiu, J. W. Lown & R. E. Dickerson (1997). <i>Structure</i> , <b>5</b> , 1033–1046.
	(B109) C. Mayer-Jung, D. Moras & Y. Timsit (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>270</b> , 328–335.
	(B110) C. M. Nunn, E. Garman & S. Neidle (1997). <i>Biochemistry</i> , <b>36</b> , 4792–4799.
	(B111) S. Portmann, K.-H. Altmann, N. Reynes & M. Egli (1997). <i>J. Am. Chem. Soc.</i> <b>119</b> , 2396–2403.
	(B112) H. Qiu, J. C. Dewan & N. C. Seeman (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>267</b> , 881–898.
	(B113) M. Shatzky-Schwartz, N. D. Arbuckle, M. Eisenstein, D. Rabinovich, A. Bareket-Samish, T. E. Haran, B. F. Luisi & Z. Shakked (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>267</b> , 565–623.
	(B114) A. A. Wood, C. M. Nunn, J. O. Trent & S. Neidle (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>269</b> , 827–841.

Table A23.3.1.3. X-ray analyses of Z helices

See introductory notes to Table A23.3.1.1. odm = 6*H*,8*H*-3,4-dihydropyrimido[4,5*c*][1,2]oxazin-7-one.

## (a) Hexadecamers

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CGCGCGTTTTCGCGCG (hairpin)	C2	4	8	1988, UCLA	UDP011	(Z20, Z25)

## (b) Decamers (disordered)

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
GCGCGCGCGC	<i>P</i> <sub>6<sub>5</sub></sub>	6	2	1996, Ohio State	ZDJ050	(Z46)

## (c) Octamers

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CGCICICG	<i>P</i> <sub>6<sub>5</sub></sub>	6	8	1992, Thomas Jefferson	ZDH030	(Z32)
CGCGCGCG	<i>P</i> <sub>6<sub>5</sub></sub>	6	8	1985, MIT	(ZDH017)	(Z10)
CGCATGCG	<i>P</i> <sub>6<sub>5</sub></sub>	6	8	1985, MIT	(ZDH016)	(Z10)

## (d) Hepamers (overhanging 5' bases)

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
GCGCGCG	<i>P</i> <sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></sub>	4	6	1997, Oregon State	ZDG054	(Z50)
G <sup>5me</sup> CGCGCG	<i>P</i> <sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></sub>	4	6	1997, Oregon State	ZDG055	(Z50)
GCGCGCG/ GCGCGCT	<i>P</i> <sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></sub>	4	6	1997, Oregon State	ZDG056	(Z50)
GCGCGCG	<i>P</i> <sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></sub>	4	6	1997, Ohio State	ZDG057	(Z51)

## (e) Hexamers

## (1) Alternating CG: Pu-Py alternation retained

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CGCGCG, Mg	<i>P</i> <sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></sub>	4	6	1989, MIT	ZDF002	(Z23)
CGCGCG, DL racemate	<i>P</i> <sub>1</sub>	2	6	1993, Osaka	ZDF040	(Z36)

## 23. STRUCTURAL ANALYSIS AND CLASSIFICATION

Table A23.3.1.3. *X-ray analyses of Z helices (cont.)*

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CGCGCG/spermine	$P2_12_12_1$	4	6	1991, MIT	ZDF029	(Z29)
CGCGCG/spermine, 163 K	$P2_12_12_1$	4	6	1994, MIT	ZDF035	(Z41)
CGCGCG/spermine, Mg	$P2_12_12_1$	4	6	1979, MIT	ZDF001	(Z1, Z23)
CGCGCG/spermidine	$P2_12_12_1$	4	6	1996, MIT	ZDF052	(Z47)
CGCGCG/thermospermidine	$P2_12_12_1$	4	6	1996, MIT	ZDF053	(Z48)
CGCGCG, Co, Mg	$P2_12_12_1$	4	6	1985, MIT	(ZDF019)	(Z11)
CGCGCG, Co, Mg	$P2_12_12_1$	4	6	1993, Illinois	(ZDF044)	(Z37)
CGCGCG/spermine, Co	$P2_12_12_1$	4	6	1993, Illinois	(ZDF045)	(Z37)
CGCGCG, Ru	$P2_12_12_1$	4	6	1987, MIT	(ZDF007)	(Z18)
CG c g CG	$P2_12_12_1$	4	6	1989, MIT	(ZHF026)	(Z24)

(2) Alternating CG: Pu-Py alternation broken

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CCGCGG	$C222_1$	8	6	1994, Moscow	UDF025	(Z42)

(3) Modified CG bases: Pu-Py alternation retained

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CG <sup>ara</sup> CGCG	$P2_12_12_1$	4	6	1989, MIT	(ZDFS27)	(Z24)
CGC <sup>6mo</sup> GCG	$P2_12_12_1$	4	6	1990, Rutgers	ZDFB21	(Z26)
CGCG <sup>4mo</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1990, Cambridge	ZDFB25	(Z27)
CGCG <sup>4mo</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1993, Manchester	ZDFB36	(Z35)
CGCG <sup>5br</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1996, Manchester	ZDFB51	(Z49)
CGCG <sup>odm</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1995, Cambridge	ZDFB43	(Z43)
<sup>5me</sup> CG <sup>5me</sup> CG <sup>5me</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1982, MIT	ZDFB03	(Z6, Z7)
<sup>5br</sup> CG <sup>5br</sup> CG <sup>5br</sup> CG, 291 K	$P2_12_12_1$	4	6	1986, Strasbourg	ZDFB04	(Z16, Z19)
<sup>5br</sup> CG <sup>5br</sup> CG <sup>5br</sup> CG, 310 K	$P2_12_12_1$	4	6	1986, Strasbourg	ZDFB05	(Z16, Z19)
Aminohexyl-CG <sup>5br</sup> CGCG	C2	4	6	1993, Illinois	(ZDFA32)	(Z38)
<sup>ara</sup> CG <sup>ara</sup> CG <sup>ara</sup> CG (disordered)	$P6_522$	12	2	1992, Illinois	ZDFS33	(Z34)

(4) Modified CG bases: Pu-Py alternation broken

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
<sup>5me</sup> CG <sup>5me</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1993, Oregon State	ZDFB37	(Z40)

(5) With A, T, U, I bases: Pu-Py alternation retained

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
<sup>5me</sup> CGTA <sup>5me</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1984, MIT	ZDFB06	(Z8)
CGT <sup>2am</sup> ACG	$P3_221$	6	3	1995, Rutgers	ZDFB41	(Z44)
CGT <sup>2am</sup> ACG, Pt	$P3_221$	6	3	1995, Rutgers	ZDFB42	(Z44)
CGU <sup>2am</sup> ACG	$P2_12_12_1$	4	6	1992, Rutgers	ZDFB31	(Z33)
<sup>5me</sup> CGUA <sup>5me</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1990, Oregon State	ZDFB24	(Z28)
<sup>5me</sup> CGUA <sup>5me</sup> CG, Cu	$P2_12_12_1$	4	5	1991, Oregon State	ZDFB10	(Z30)
CACGTG	$P2_12_12_1$	4	6	1988, MIT	(ZDF008)	(Z21)
C <sup>2am</sup> ACGTG	$P2_12_12_1$	4	6	1986, MIT	ZDFB11	(Z17)
CGCICG	$P2_12_12_1$	4	6	1993, Thomas Jefferson	(ZDFB34)	(Z39)
CACGCG/CGCGTG	$P2_12_12_1$	4	6	1995, Madras	ZDF039	(Z45)
CGCACG/CGTGCG	$P2_1$	2	6	1995, Madras	ZDF038	(Z45)

(6) With A, T, U, I bases: Pu-Py alternation broken

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
<sup>5br</sup> CGAT <sup>5br</sup> CG	$P2_12_12_1$	4	6	1985, MIT	(ZDFB09)	(Z13)

### 23.3. NUCLEIC ACIDS

Table A23.3.1.3. *X-ray analyses of Z helices (cont.)*

(7) With mismatches (underlined>)

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CGCG <u>T</u> G	<i>P</i> <sub>2</sub> <sub>1</sub> <sub>2</sub> <sub>1</sub>	4	6	1985, MIT	ZDF013	(Z12)
CGCG <sup>50</sup> <u>U</u> G	<i>P</i> <sub>2</sub> <sub>1</sub> <sub>2</sub> <sub>1</sub>	4	6	1989, MIT	ZDFB12	(Z22)
<sup>5br</sup> U <u>G</u> CGCG	<i>P</i> <sub>2</sub> <sub>1</sub> <sub>2</sub> <sub>1</sub>	4	6	1986, Cambridge	ZDFB14	(Z15)
CGCG <u>T</u> G, Co, Mg	<i>P</i> <sub>2</sub> <sub>1</sub> <sub>2</sub> <sub>1</sub>	4	6	1993, Illinois	ZDF046	(Z37)
CGCG <u>T</u> G, Cu, Mg	<i>P</i> <sub>2</sub> <sub>1</sub> <sub>2</sub> <sub>1</sub>	4	6	1993, Illinois	ZDF047	(Z37)
<sup>5me</sup> CG <sup>5me</sup> <u>C</u> G <u>T</u> G, Ba	<i>P</i> <sub>2</sub> <sub>1</sub> <sub>2</sub> <sub>1</sub>	4	6	1993, Illinois	(ZDFB48)	(Z37)

(f) Tetramers

Sequence	Space group	Z	Ubp	Date, institution	NDB No.	Reference
CGCG	<i>C</i> 222 <sub>1</sub>	8	4	1980, UCLA (CIT)	ZDD015	(Z3, Z4, Z5)
CGCG (disordered)	<i>P</i> 6 <sub>5</sub>	6	6	1980, MIT	ZDD023	(Z2)

References (numbered chronologically by year and alphabetically by first author within each year)

- Year Reference
- 1979 (Z1) A. H.-J. Wang, G. J. Quigley, F. J. Kolpak, J. L. Crawford, J. H. van Boom, G. van der Marel & A. Rich (1979). *Nature (London)*, **282**, 680–686.
- 1980 (Z2) J. L. Crawford, F. J. Kolpak, A. H.-J. Wang, G. J. Quigley, J. H. van Boom, G. van der Marel & A. Rich (1980). *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, **77**, 4016–4020.  
(Z3) H. R. Drew, T. Takano, S. Tanaka, K. Itakura & R. E. Dickerson (1980). *Nature (London)*, **286**, 567–573.
- 1981 (Z4) R. E. Dickerson, H. R. Drew & B. N. Conner (1981). *Biomolecular stereodynamics*, Vol. 1, edited by R. H. Sarma, pp. 1–34. New York: Adenine Press.  
(Z5) H. R. Drew & R. E. Dickerson (1981). *J. Mol. Biol.* **152**, 723–736.
- 1982 (Z6) S. Fujii, A. H.-J. Wang, G. van der Marel, J. H. van Boom & A. Rich (1982). *Nucleic Acids Res.* **10**, 7879–7892.  
(Z7) S. Fujii, A. H.-J. Wang, J. van Boom & A. Rich (1982). *Nucleic Acids Res. Symp. Ser.* **11**, 109–112.
- 1984 (Z8) A. H.-J. Wang, T. Hakoshima, G. van der Marel, J. H. van Boom & A. Rich (1984). *Cell*, **37**, 321–331.
- 1985 (Z9) R. G. Brennan & M. Sundaralingam (1985). *J. Mol. Biol.* **181**, 561–563.  
(Z10) S. Fujii, A. H.-J. Wang, G. J. Quigley, H. Westerink, G. van der Marel, J. H. van Boom & A. Rich (1985). *Biopolymers*, **24**, 243–250.  
(Z11) R. V. Gessner, G. J. Quigley, A. H.-J. Wang, G. A. van der Marel, J. H. van Boom & A. Rich (1985). *Biochemistry*, **24**, 237–240.  
(Z12) P. S. Ho, C. A. Frederick, G. J. Quigley, G. A. van der Marel, J. H. van Boom, A. H.-J. Wang & A. Rich (1985). *EMBO J.* **4**, 3617–3623.  
(Z13) A. H.-J. Wang, R. V. Gessner, G. A. van der Marel, J. H. van Boom & A. Rich (1985). *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, **82**, 3611–3615.
- 1986 (Z14) R. G. Brennan, E. Westhof & M. Sundaralingam (1986). *J. Biomol. Struct. Dyn.* **3**, 649–665.  
(Z15) T. Brown, G. Kneale, W. N. Hunter & O. Kennard (1986). *Nucleic Acids Res.* **14**, 1801–1809.  
(Z16) B. Chevrier, A. C. Dock, B. Hartmann, M. Leng, D. Moras, M. T. Thuong & E. Westhof (1986). *J. Mol. Biol.* **188**, 707–719.  
(Z17) M. Coll, A. H.-J. Wang, G. A. van der Marel, J. H. van Boom & A. Rich (1986). *J. Biomol. Struct. Dyn.* **4**, 157–172.
- 1987 (Z18) P. S. Ho, C. A. Frederick, D. Saal, A. H.-J. Wang & A. Rich (1987). *J. Biomol. Struct. Dyn.* **4**, 521–534.  
(Z19) E. Westhof (1987). *J. Biomol. Struct. Dyn.* **5**, 581–600.
- 1988 (Z20) R. Chattopadhyaya, S. Ikuta, K. Grzeskowiak & R. E. Dickerson (1988). *Nature (London)*, **334**, 175–179.  
(Z21) M. Coll, I. Fita, J. Lloveras, J. A. Subirana, F. Bardella, T. Huynh-Dinh & J. Igolen (1988). *Nucleic Acids Res.* **16**, 8695–8705.
- 1989 (Z22) M. Coll, D. Saal, C. A. Frederick, J. Aymami, A. Rich & A. H.-J. Wang (1989). *Nucleic Acids Res.* **17**, 911–923.  
(Z23) R. V. Gessner, C. A. Frederick, G. J. Quigley, A. Rich & A. H.-J. Wang (1989). *J. Biol. Chem.* **264**, 7921–7935.  
(Z24) M.-K. Teng, Y.-C. Liaw, G. A. van der Marel, J. H. van Boom & A. H.-J. Wang (1989). *Biochemistry*, **28**, 4923–4928.
- 1990 (Z25) R. Chattopadhyaya, K. Grzeskowiak & R. E. Dickerson (1990). *J. Mol. Biol.* **211**, 189–210.  
(Z26) S. L. Ginell, S. Kuzmich, R. A. Jones & H. M. Berman (1990). *Biochemistry*, **29**, 10461–10465.  
(Z27) L. Van Meervelt, M. H. Moore, P. K. T. Lin, D. M. Brown & O. Kennard (1990). *J. Mol. Biol.* **216**, 773–781.  
(Z28) G. Zhou & P. S. Ho (1990). *Biochemistry*, **29**, 7229–7236.
- 1991 (Z29) M. Egli, L. D. Williams, Q. Gao & A. Rich (1991). *Biochemistry*, **30**, 11388–11402.  
(Z30) B. H. Geierstanger, T. F. Kagawa, S.-L. Chen, G. J. Quigley & P. S. Ho (1991). *J. Biol. Chem.* **266**, 20185–20191.
- 1992 (Z32) V. D. Kumar, R. W. Harrison, L. C. Andrews & I. T. Weber (1992). *Biochemistry*, **31**, 1541–1550.  
(Z33) B. Schneider, S. L. Ginnell, R. Jones, B. Gaffney & H. M. Berman (1992). *Biochemistry*, **21**, 9622–9628.  
(Z34) H. Zhang, G. A. van der Marel, J. H. van Boom & A. H.-J. Wang (1992). *Biopolymers*, **32**, 1559–1569.
- 1993 (Z35) A. R. Cervi, A. Guy, G. A. Leonard, R. Teoule & W. N. Hunter (1993). *Nucleic Acids Res.* **21**, 5623–5629.  
(Z36) M. Doi, M. Inoue, K. Tomoo, T. Ishida, Y. Ueda, M. Akagi & H. Urata (1993). *J. Am. Chem. Soc.* **115**, 10432–10433.  
(Z37) Y.-G. Gao, K. Sriram & A. H.-J. Wang (1993). *Nucleic Acids Res.* **21**, 4093–4101.  
(Z38) Y.-C. Jean, Y.-G. Gao & A. H.-J. Wang (1993). *Biochemistry*, **32**, 381–388.

## 23. STRUCTURAL ANALYSIS AND CLASSIFICATION

Table A23.3.1.3. *X-ray analyses of Z helices (cont.)*

Year	Reference
	(Z39) V. D. Kumar & I. T. Weber (1993). <i>Nucleic Acids Res.</i> <b>9</b> , 2201–2208.
	(Z40) G. P. Schroth, T. F. Kagawa & P. Shing Ho (1993). <i>Biochemistry</i> , <b>32</b> , 13381–13392.
1994	(Z41) D. Bancroft, L. D. Williams, A. Rich & M. Egli (1994). <i>Biochemistry</i> , <b>33</b> , 1073–1086.
	(Z42) L. Malinina, L. Urpi, X. Salas, T. Huynh-Dinh & J. A. Subirana (1994). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>243</b> , 484–493.
1995	(Z43) M. H. Moore, L. Van Meervelt, S. A. Salisbury, P. Kong Thoo Lin & D. M. Brown (1995). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>251</b> , 665–673.
	(Z44) G. N. Parkinson, G. M. Arvantis, L. Lessinger, S. L. Ginnell, R. Jones, B. Gaffney & H. M. Berman (1995). <i>Biochemistry</i> , <b>34</b> , 15487–15495.
	(Z45) C. Sadasivan & N. Gautham (1995). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>248</b> , 918–930.
1996	(Z46) C. Ban, B. Ramakrishnan & M. Sundaralingam (1996). <i>Biophys. J.</i> <b>71</b> , 1215–1221.
	(Z47) H. Ohishi, I. Nakanishi, K. Inubushi, G. A. van der Marel, J. H. van Boom, A. Rich, A. H.-J. Wang, T. Hakoshima & K. Tomita (1996). <i>FEBS Lett.</i> <b>391</b> , 143–156.
	(Z48) H. Ohishi, N. Terasoma, I. Nakanishi, G. A. van der Marel, J. H. van Boom, A. Rich, A. H.-J. Wang, T. Hakoshima & K. Tomita (1996). <i>FEBS Lett.</i> <b>398</b> , 291–296.
	(Z49) M. R. Peterson, S. J. Harrop, S. M. McSweeney, G. A. Leonard, A. W. Thompson, W. N. Hunter & J. R. Helliwell (1996). <i>J. Synchrotron Rad.</i> <b>3</b> , 24–34.
1997	(Z50) B. H. M. Moers, B. F. Eichman & P. S. Ho (1997). <i>J. Mol. Biol.</i> <b>269</b> , 796–810.
	(Z51) B. Pan, C. Ban, M. Wahl & M. Sundaralingam (1997). <i>Biophys. J.</i> <b>83</b> , 1553–1561.