



УДК 577.156.3.02 : 541.63

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ УРИДИНА
И УРИДИН-3'-ФОСФАТА И ИХ НЕВАЛЕНТНЫХ КОМПЛЕКСОВ
С РИБОНУКЛЕАЗОЙ S

Липкин Г. М.

Институт биоорганической химии им. М. М. Шемякина
Академии наук СССР, Москва

На основе конформационного анализа уридина и уридин-3'-фосфата и их комплексов с рибонуклеазой S показано, что как в свободном, так и в связанном состоянии самой предпочтительной является антиконформация при *gosh-gosh*-ориентации 5'-CH₂OH-группы и *trans*-положении фосфата относительно связи C_{3'}—C_{4'}.

Панкреатическая рибонуклеаза (РНК-аза) катализирует расщепление фосфодиэфирных связей в олиго- и полирибонуклеотидах с образованием первоначально 2',3'-циклофосфатов и гидролизует последние до 3'-нуклеотидов. Рентгеноструктурный анализ РНК-азы S и ее комплексов с субстратоподобными ингибиторами позволил выделить область связывания субстрата белком [1]. Однако исследования таких комплексов не позволяют получить точных сведений ни о конформации субстрата в поле белка, ни о его положении относительно функциональных групп активного центра. Для понимания каталитического акта также существенно знание потенциальной поверхности связывания субстрата и его возможных конформационных перестроек. Настоящее сообщение посвящено применению метода теоретического конформационного анализа для исследования комплексов РНК-азы S с уридином и уридин-3'-фосфатом. Ранее был приведен аналогичный расчет комплекса РНК-азы S с уридин-2',3'-циклофосфатом [2].

Конформация уридина определяется углом вращения χ основания вокруг гликозидной связи и углом вращения ψ экзоциклической группы CH₂OH вокруг связи C_{4'}—C_{5'} (рис. 1). Угол $\chi = 0^\circ$, когда связи C_{1'}—O₁ и N₁—C₆ заслонены [3]. Для *gosh-gosh* (gg) рогамеров 5'-CH₂OH группы угол $\psi = 60^\circ$, *trans-gosh* (tg) $\psi = 180^\circ$, *gosh-trans* (gt) $\psi = 300^\circ$ [4]. В уридин-3'-фосфате положение фосфатной группы определяется углом вращения φ вокруг связи C_{3'}—O_{3'} (рис. 1); $\varphi = 0^\circ$ при *cis*-расположении связей C_{3'}—C_{4'} и P—O_{3'} [4]. Уридин-3'-фосфат рассматривался в форме моноаниона, так как в этом случае состояние фосфатной группы близко к ее состоянию в фосфодиэфирах. Геометрические параметры урацила приведены в работе [5]. Для сахарного кольца рассматривались две его структурные модификации — 2'-эндо и 3'-эндо. Геометрические параметры рибозофосфатной части нуклеотида в первом случае приняты из рентгеноструктурного исследования цитидин-3'-фосфата [6], во втором — из исследования аденозин-3'-фосфата [7]. При расчете уридина и уридин-

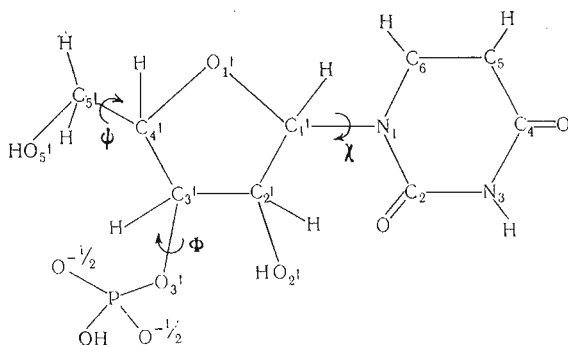


Рис. 1. Модель уридин-3'-фосфата в конформации $\chi (C_1'-N) = \psi (C_4'-C_5') = \phi (C_3'-O_3') = 0^\circ$

3'-фосфата координаты всех атомов задавались в декартовой системе координат, связанной с плоскостью основания.

Анализ возможных конформационных состояний уридина и уридин-3'-фосфата в поле белка проводился таким образом, что основание фиксировалось по координатам атомов 1-метилурацила в его глобальной ориентации в пиридинсвязывающем участке РНК-азы S, найденной в [8]. При оценке энергии взаимодействия уридина и уридин-3'-фосфата с РНК-азой S учитывались не только те остатки, которые располагаются в самом фосфатсвязывающем участке активного центра, но и остатки, расположенные вблизи него. Из молекулярной модели РНК-азы S видно, что нуклеотидсвязывающий участок фермента формируется за счет остатков 4—12, 35, 39—45, 64—73, 107—112, 116—122. Координаты атомов уридин- и уридин-3'-фосфата задавались в этом случае в декартовой системе координат РНК-азы S [9]. Координаты атомов водорода амидных групп и ароматических радикалов белка были специально рассчитаны. Боковая цепь остатка His¹¹⁹ фиксировалась в ее каталитически активной ориентации ($\chi^1(C^\alpha-C^\beta) = 90^\circ$, $\chi^2(C^\beta-C^\gamma) = 65^\circ$ [2], а не по координатам, приводимым в [9], по которым имидазол располагается в фосфатсвязывающей области белка.

При расчете потенциальной энергии во внимание принимались невалентные и электростатические взаимодействия, водородные связи и торсионная энергия. Невалентные взаимодействия учитывались по потенциалу Леннарда — Джонса с параметризацией Скотта и Шераги [10]. Группы белка с центральным алифатическим атомом углерода рассматривались как обобщенные атомы [11]. Взаимодействия между атомами водорода и кислорода, способными образовывать водородные связи, описывались потенциалом Морзе [12]. При оценке электростатической энергии по закону Кулона точечные заряды на атомах урацила взяты из [13], а на атомах рибозы и фосфатной группы приняты такими, как в нуклеотидной единице [14]. Для величины диэлектрической проницаемости (ϵ) принято значение 10 [15]. Торсионный барьер вокруг гликозидной связи принят равным нулю, вокруг связей $C_4'-C_5'$ и $C_3'-O_3'$ — 3 ккал/моль [14].

Уридин. Рассмотрим зависимость относительной энергии невалентных взаимодействий в урдине при двух конформациях сахара 3'-эндо- и 2'-эндо (рис. 2, а и 3, а). Кривые для ротамеров *gt* и *tg* относительно связи $C_4'-C_5'$ идентичны. У ротамера *gg* в син-области возникают невалентные отталкивания атомов O_2 и O_5' , поэтому при соответствующих значениях угла χ энергии на 20 ккал/моль (3'-эндо) и 10 ккал/моль (2'-эндо) выше, чем у ротамеров *gt* и *tg*. При конформации сахара 3'-эндо наиболее вероятными значениями угла χ являются 260—280 и 310—360°, при 2'-эндо диапазон угла χ уже — 320—360°. Энергетическая разность син- и антиконформаций существенно зависит от геометрии сахара. В первом случае эта разница между самой выгодной конформацией анти- (χ 340, ψ 60°)

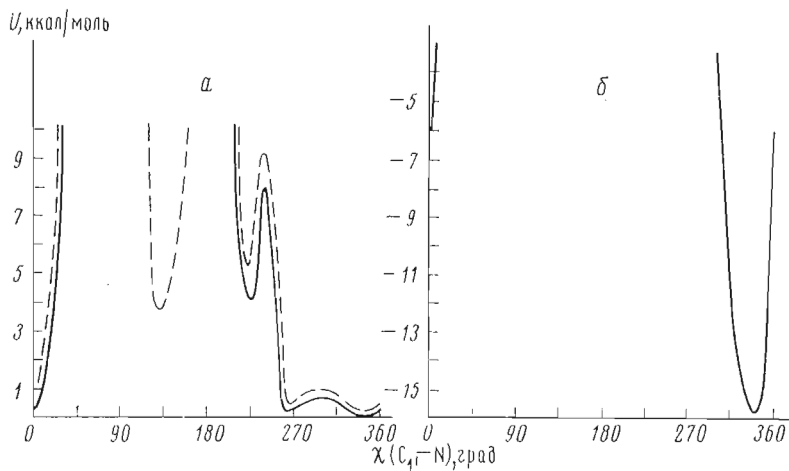


Рис. 2. Зависимость энергии невалентных взаимодействий от угла $\chi(C_1-N)$ при конформации сахара 3'-эндо: а — в уридине (относительные величины), б — в комплексе уридина с РНК-азой S (абсолютные величины). Сплошная линия относится к *gg*-ротамеру экзоциклической группы 5'-CH₂ОН, пунктирная — к *tg*- и *gt*-ротамерам

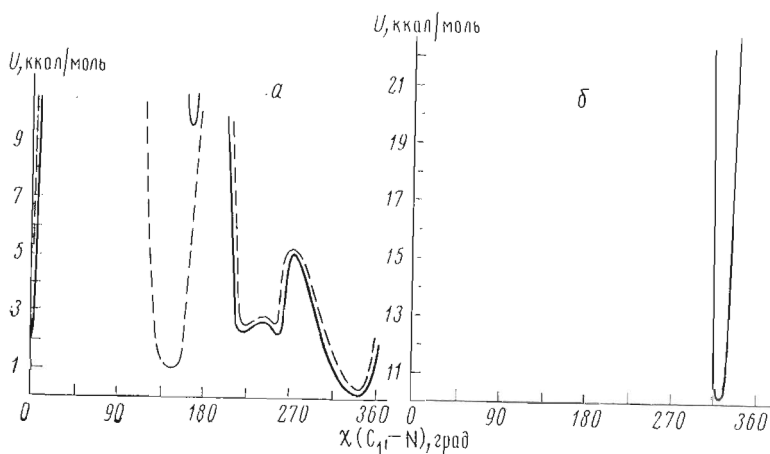


Рис. 3. Зависимость энергии невалентных взаимодействий от угла $\chi(C_1-N)$ при конформации сахара 2'-эндо: а — в уридине, б — в комплексе уридина с РНК-азой S. Сплошная линия относится к *gg*-ротамеру, пунктирная — к *tg*- и *gt*-ротамерам

и самой выгодной конформацией син- (χ 145, ψ 180°) составляет 3,7 ккал/моль, во втором — только 1 ккал/моль. В области син- возникают короткие контакты атомов O₂ и водорода при атоме C₆ с водородами при C_{2'} и C_{3'} (в зависимости от конформации углевода) и с атомом O_{1'}. Перепады энергий соответствующих локальных минимумов в пиримидиновых нуклеозидах составляют значительную величину, прежде всего при геометрии сахара 3'-эндо, поэтому вероятность конформации син- мала. Аналогичный вывод получен Кистером и Дашевским [16]. Картина существенно отлична от той, которая имсет место в пиримидин-2',3'-циклофосфатах, где преимущественной является сип-конформация [17, 18]. Энергетические кривые, рассчитанные с учетом зарядов на атомах, для каждого ротамера 5'-CH₂ОН-группы симбатны кривым невалентных взаимодействий на рис. 2, а и 3, а. Однако если ротамеры *gg*, *tg* и *gt* практически изоэнергетичны по невалентным взаимодействиям, то при учете электростати-

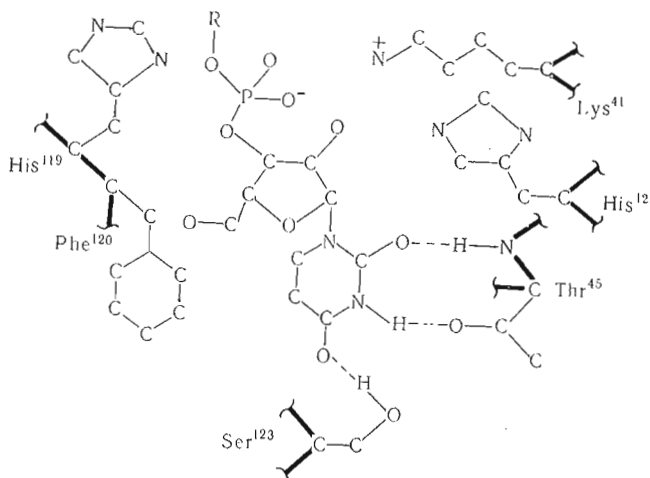


Рис. 4. Схематическое расположение субстрата относительно некоторых остатков рибонуклеазы

ческой составляющей преимущественной становится конформация *gg*, ротамеры *tg* и *gt* проигрывают ей 0,5 и 0,3 ккал/моль.

Результаты расчета находятся в согласии с экспериментальным материалом по структурам пиримидиновых нуклеозидов [4]. Во всех случаях, за исключением двух, в которых геометрия рибоз — 2'-эндо, обнаружена анти-конформация. Что касается положений экзоциклической группы $5'=\text{CH}_2\text{OH}$, то с наибольшим весом представлен ротамер *gg*. Конформации пиримидиновых нуклеозидов, наблюдаемые в кристалле, являются предпочтительными в растворе [19—21]. Малая зависимость константы спин-спинового взаимодействия протонов при атомах $\text{C}(4')$ и $\text{C}(5')$ от температуры показывает, что энергетическая разность между различными ротамерами относительно связи C_4-C_5 мала [20].

Комплекс РНК-азы *S* с уридином. В комплексе возможные значения угла вращения χ вокруг гликозидной связи располагаются только в анти-области: χ 330—350° (3'-эндо) и χ 315—325° (2'-эндо) (рис. 2, б и 3, б). В син-области величина энергии невалентных взаимодействий с белком превышает 5-й порядок из-за отталкивания атомов рибозы с атомами остатков His¹², Val⁴³, Lys⁴¹, Asn⁴⁴. Так, в случае -His¹²- каталитически активный атом азота N^{ε2} боковой цепи находится на расстоянии ~2Å от атомов O_{1'} и C_{4'} рибозы. Из факта контактирования имидазольного кольца -His¹² с указанными атомами, а не с атомом O_{2'} нуклеозида следует, что комплекс нуклеотида с РНК-азой, в котором нуклеотид находится в син-конформации, если бы и образовался, был бы непродуктивен.

В приближении жесткой фиксации атомов белка по координатам, приведенным в работе [9], связывание нуклеозида с конформацией сахара 3'-эндо осуществляется более оптимальным образом, чем с 2'-эндо. Этот факт находит отражение в энергиях невалентных взаимодействий комплексов (рис. 2, б и 3, б). В оптимальной ориентации квазисубстрата при геометрии сахара 2'-эндо все же имеют место небольшие невалентные отталкивания его атомов с атомами остатков His¹², Lys⁴¹ (рис. 4). Напротив, в случае геометрии 3'-эндо ($\chi \sim 340^\circ$, рис. 2, б) с теми остатками, с которыми при син-конформации возникали слишком короткие контакты, существенными оказываются дисперсионные притяжения. Так, энергия взаимодействия уридина с -His¹²-, -Lys⁴¹-, -Val⁴³-, -Asn⁴⁴-, а также с -Phe¹²⁰ достигают $-1 \div -2$ ккал/моль. Характер энергетических кривых для ротамеров *gg*, *gt* и *tg* в поле белка идентичен. Однако, как и в нуклеозиде, предпочтительным значением угла ψ является 60°.

Уридин-3'-фосфат. В структурах нуклеотидов и полинуклеотидов форма рибозного цикла 3'-эндо представлена с подавляющим весом [4], поэтому конформационный анализ уридин-3'-фосфата проведен при этой геометрии сахара. Как видно из рис. 5, доступные значения угла вращения фосфатной группы φ ($C_{3'}-O_{3'}$) при анти-ориентации основания находятся в интервале $180-280^\circ$, в глобальной конформации φ составляет 180° . При других значениях φ фосфатная группа находится в непосредственной близости от рибозного кольца, что приводит к невалентным отталкиваниям. Кривые для *gg*- и *tg*-ротамеров экзациклической группы идентичны. Для *gt*-ротамера при угле φ , равном $-90-30^\circ$, энергии существенно выше из-за контактов фосфатной группы с атомом O_5' (рис. 5). Включение в расчет электростатической составляющей энергии приводит к небольшому понижению на 0,5 ккал/моль энергии оптимальной конформации со значением угла ψ ($C_4'-C_5'$), равным 60° . Вращение вокруг связи $P_3'-O_{3'}$ определяется только формой торсионного потенциала: три положения, оптимальные по торсионной энергии, изоэнергетичны. Аналогичная зависимость энергии рибозофосфатной единицы от параметра φ получена Брохом и соавт. [22]. Рассчитанный диапазон возможных значений угла φ ($C_{3'}-O_{3'}$) (рис. 5) находится в согласии со структурными данными по нуклеозид-3'-фосфатам, у которых φ равен $190-270^\circ$ [4].

Энергетические кривые $U(\chi(C_1'-N))$, построенные при фиксации угла φ при 200° , для уридин-3'-фосфата совершенно симбатны кривым для уридина (рис. 2, а). По энергии невалентных взаимодействий оптимальный син-конформер (χ 140° , *tg*) проигрывает самому выгодному анти-конформеру (χ 340° , *gg*) 4 ккал/моль; с учетом электростатических взаимодействий эта разница достигает 4,5 ккал/моль. Результаты расчета находятся в согласии с исследованием структуры уридин-3'-фосфата и цитидин-3'-фосфата в водных растворах [20] и не соответствуют выводу работы [21], где для цитидин-3'-фосфата предложена син-конформация.

Комплекс РНК-азы S с уридин-3'-фосфатом. Потенциальная поверхность $\chi(C_1'-N) - \varphi(C_{3'}-O_{3'})$ невалентных взаимодействий уридин-3'-фосфата с белком (с учетом внутримолекулярной энергии уридин-3'-фосфата) приведена на рис. 6. Карта построена для ротамера *gg* экзациклической группы и при *транс*-ориентации связей $P-O_3'H$ и $C_3'-O_3'$. Рассматривался 3'-эндо-конформер рибозного кольца. Низкоэнергетический (в пределах 3 ккал/моль) диапазон значений угла вращения вокруг гликозидной связи составляет только 20° (χ $325-345^\circ$). Свобода движения фосфатной группы вокруг связи $C_{3'}-O_{3'}$ существенно больше. При оптимальном значении угла χ , равном 335° (рис. 6), она практически определяется зависимостью энергии от угла φ в свободном уридин-3'-фосфате (рис. 5). В комплексе также имеется два локальных минимума при φ 210° и φ 280° . Энергия первого минимума на 1 ккал/моль ниже, чем второго, т. е. он глобален. Если помимо невалентных взаимодействий учесть электростатические взаимодействия фосфатной группы с близко расположенными от него заряженными боковыми цепями остатков Lys⁴¹ и His¹¹⁹ (см. рис. 4), то это приводит к дополнительной стабилизации глобального ми-

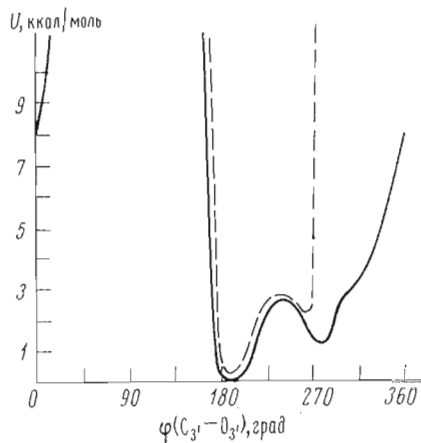


Рис. 5. Зависимость относительной энергии невалентных взаимодействий от угла вращения φ ($C_{3'}-O_{3'}$) в уридин-3'-фосфате при значении $\chi(C_1'-N)$ 335° . Сплошная линия относится к *gg*- и *tg*-ротамерам экзациклической группы 5'- CH_2OH , пунктирная — к *gt*-ротамеру

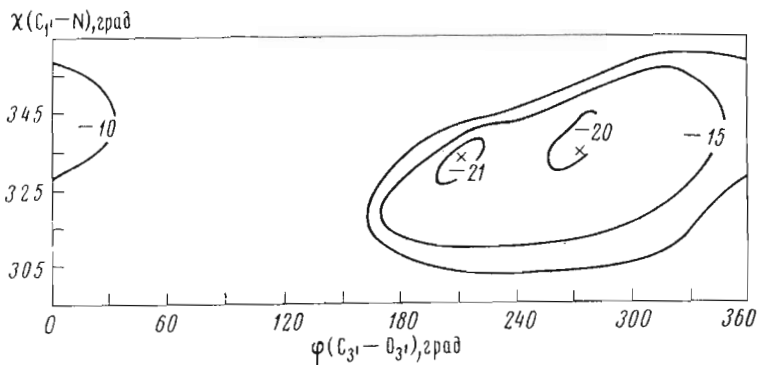


Рис. 6. Конформационная карта $\chi(C_1'-N) - \varphi(C_3'-O_3')$ невалентных взаимодействий комплекса уридин-3'-фосфата с РНК-азой S. Знаком «x» помечены локальные минимумы

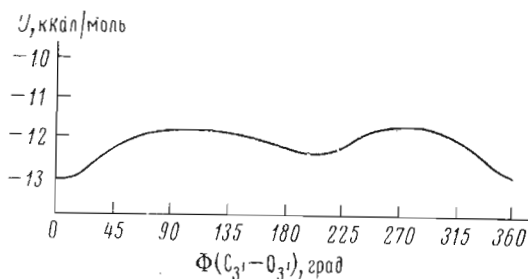


Рис. 7. Зависимость энергии электростатических взаимодействий фосфатной группы с заряженными цепями остатков Lys⁴¹, His¹¹⁹ в комплексе уридин-3'-фосфата с РНК-азой S

нимума со значением φ 210° (рис. 7). Другой локальный минимум на кривой электростатических взаимодействий (φ 15°) нереален в уридин-3'-фосфате по невалентным взаимодействиям (рис. 5).

Электростатические взаимодействия с заряженными группами РНК-азы не только ориентируют фосфат в поле белка, но и составляют основную часть энергии его связывания (при $\epsilon = 10$, $U_{эл} = -12$ ккал/моль, рис. 7). Подчеркнем, что энергии невалентного взаимодействия уридина и уридин-3'-фосфата с белком близки (-13 и -16 ккал/моль). При определении термодинамических параметров взаимодействия нуклеозидов и нуклеотидов с РНК-азой А Флогель и соавторы [23] пришли к заключению, что связывание нуклеозидной части имеет ван-дер-ваальсову природу, а фосфатной части — электростатическую.

В глобальной ориентации уридин-3'-фосфата в поле РНК-азы S сам нуклеотид находится в анти-конформации. При плотной «посадке» нуклеозидной части на белок атом азота в ϵ -положении имидазольного кольца -His¹² оказывается на расстоянии ван-дер-ваальсового касания с атомом O_{2'} рибозы, т. е. стереохимически предрасположен для образования водородной связи с протоном гидроксила O_{2'}H (см. рис. 4). Таким образом, -His¹² может выполнять роль нуклеофильного катализатора, активирующего атом O_{2'} для взаимодействия с фосфором. Вместе с тем при ином положении протона связи O_{2'}-H может образовываться более слабая водородная связь с амидом боковой цепи -Asn⁴⁴ ($r(O_{2'} \dots O^{\gamma}(Asn^{44})) \sim 3,2 \text{ \AA}$), наблюдаемая в abortивном комплексе РНК-азы S с цитидин-3'-фосфатом [1]. Образование связи O_{2'}-P в переходном состоянии вполне возможно, так как при оптимальном положении фосфата в поле белка ($\varphi(C_3' - O_3') = 210^\circ$) атом O_{2'} находится на расстоянии 3,8 Å от атома P, т. е. на расстоянии, близком сумме ван-дер-ваальсовых радиусов этих атомов.

Координаты атомов (в Å) уридин-3'-фосфата в глобальной ориентации в комплексе с рибонуклеазой (в декартовой системе координат РНК-азы S [9])

АТОМЫ	x	y	z	АТОМЫ	x	y	z
Основание				Рибоза			
N ₁	11,1	6,7	3,3	H _(C_{2'})	10,7	5,7	5,8
C ₂	11,9	7,7	3,7	O _{2'}	12,1	4,3	5,8
O _(C₂)	12,9	7,5	4,4	C _{3'}	9,9	4,1	4,7
N ₃	11,5	9	3,2	H _(C_{3'})	9,1	4,6	4,5
C ₄	10,4	9,2	2,5	O _{3'}	9,5	3,2	5,8
O ₄	10,2	10,4	2,1	C _{4'}	10,4	3,4	3,5
C ₅	9,6	7,1	2,1	H _(C_{4'})	11	2,7	3,7
H _(C₅)	8,8	8,2	1,6	C _{5'}	9,2	2,9	2,6
C ₆	10	6,8	2,6	O _{5'}	8,4	4	2,2
H _(C₆)	9,4	6,1	2,3	Фосфат			
Рибоза				P	8,4	3,6	7
O _{1'}	11,1	4,4	2,8	O	7,2	4	6,3
C _{1'}	11,6	5,3	3,8	O	9,1	4,7	7,7
H _(C_{1'})	12,6	5,8	3,8	O _{5'}	8,1	2,4	7,8
C _{2'}	11,1	5	5,1				

В найденной «каталитически активной» ориентации боковой цепи -His¹¹⁹- [2] протон связи N^δ-H имидазольного кольца находится от атомов фосфата на расстояниях, достаточных для участия в активации разрыва связи P—O_{5'}. Таким образом, в рассчитанной самой предпочтительной ориентации уридин-3'-фосфата в комплексе с РНК-азой S реализуются такие контакты между каталитическими группами активного центра фермента и определенными фрагментами уридин-3'-фосфата, которые в случае реальных субстратов фосфодиэфиров нуклеозид-3'-фосфатов могут обеспечить структурные условия расщепления фосфодиэфирной связи с участием остатков His¹² и His¹¹⁹ в соответствии с общепринятым механизмом Рэбина [24].

Расчитанные координаты уридин-3'-фосфата при значениях углов вращения χ 335, ψ 60, ϕ 210, ω 180° в системе координат РНК-азы S приведены в таблице. Из сопоставления данных координат с координатами аналога природного субстрата уридилладенозина, в котором атом O_{3'} заменен на CH₂-группу (Урса) в комплексе с РНК-азой S [25], следует, что ориентации и конформации нуклеозид-3'-фосфатной части Урса и уридин-3'-фосфата близки. Так, относительные смещения периферийных атомов O_{3'} и P уридин-3'-фосфата и Урса составляют 0,5 и 0,9 Å и являются реальными, учитывая, что ингибитор Урса может связываться несколько иначе, чем истинный субстрат.

В ранее проведенном расчете невалентного комплекса уридин-2',3'-циклофосфата с РНК-азой S [2] были также определены координаты субстрата. Из сравнения координат атомов фосфата уридин-2',3'-циклофосфата и уридин-3'-фосфата следует, что относительное смещение этих атомов составляет ~ 3 Å. Таким образом, расчетным путем подтверждена гипотеза Ричардса и Вайкофа [1], согласно которой на стадии трансэтерификации должно происходить перемещение фосфатной группы субстрата на ~ 2 Å в сторону боковой цепи остатка Lys⁴¹.

Автор выражает благодарность М. Я. Карпейскому и Е. М. Попову за внимание к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Richards F. M., Wyckoff H. W. (1971) *The Enzymes*, 3rd Ed., IV, 647—806.
2. Липкинд Г. М., Карпейский М. Я. (1975) Докл. АН СССР, **224**, 1212—1215.
3. Haschemeyer A. E. V., Rich A. (1967) *J. Molec. Biol.*, **27**, 369—384.
4. Sundaralingam M. (1973) in *Conformation of Biological Molecules and Polymers*, Jerusalem Symp. Quantum Chem. Biochem. (Pullman B., Bergmann E., eds.), Acad. Press., N. Y., **5**, 417—456.
5. Arnott S. (1970) *Progress in Biophysics and Molec. Biol.*, **21**, 265—319.
6. Sundaralingam M., Jensen L. H. (1965) *J. Molec. Biol.*, **13**, 914—929.
7. Sundaralingam M. (1966) *Acta Crystallogr.*, **21**, 495—501.
8. Липкинд Г. М., Карпейский М. Я. (1976) *Молекулярн. биология*, **10**, 395—403.
9. Wyckoff H. W., Tsernoglou D., Hanson A. W., Klock J. R., Lee B., Richards F. M. (1970) *J. Biol. Chem.*, **245**, 305—328.
10. Scott R. A., Scheraga H. A. (1966) *J. Chem. Phys.*, **45**, 2091—2101.
11. Pletnev V. Z., Pоров E. M., Kадумова F. A. (1974) *Theor. chim. acta*, **35**, 93—96.
12. Попов E. M., Дашевский B. Г., Липкинд Г. М., Архипова С. Ф. (1968) *Молекулярн. биология*, **2**, 612—620.
13. Renugopalakrishnan V., Lakshminarayanan A. V., Sasisekharan V. (1971) *Biopolymers*, **10**, 1159—1167.
14. Olson W. K., Flory P. J. (1972) *Biopolymers*, **11**, 25—41.
15. Липкинд Г. М., Архипова С. Ф., Попов E. M. (1970) *Ж. структурн. химии*, **11**, 121—126.
16. Кистер A. Э., Дашевский B. Г., Китайгородский A. И. (1971) *Молекулярн. биология*, **5**, 232—237.
17. Coulter C. L. (1973) *J. Amer. Chem. Soc.*, **95**, 570—575.
18. Липкинд Г. М. (1976) *Молекулярн. биология*, **10**, 600—603.
19. Tinoco J., Davis R. C., Jashunas S. R. (1968) *Molecular Associations in Biology* (Pullman B., ed.), pp. 77—90, Acad. Press, N. Y.
20. Blackburn V. J., Grey A. A., Smith I. C. P., Hruska F. E. (1970) *Can. J. Chem.*, **48**, 2866—2870.
21. Карпейский М. Я., Яковлев Г. И. (1975) *Биоорган. химия*, **1**, 749—757.
22. Broch H., Cornillon R., Lespinasse J. N., Vasilescu D. (1975) *Biopolymers*, **14**, 695—713.
23. Fogel M., Albert A., Biltonen R. (1975) *Biochemistry*, **14**, 2616—2621.
24. Findlay D., Herries D. G., Mathias A. P., Rabin B. R., Ross C. A. (1962) *Biochem. J.*, **85**, 152—153.
25. Richards F. M., Wyckoff H. W. (1973) *Atlas of Molecular Structures in Biology* (Phillips D. C., Richards F. M., eds.), v. 1, Ribonuclease S, Clarendon Press, Oxford.

Поступила в редакцию
4.I.1976

THEORETICAL CONFORMATIONAL ANALYSIS OF URIDINE AND URIDINE 3'-PHOSPHATE AND THEIR NONCOVALENT COMPLEXES WITH RIBONUCLEASE S

LIPKIND G. M.

*M. M. Shemyakin Institute of Bioorganic Chemistry,
Academy of Sciences of the USSR, Moscow*

The results of semi-empirical calculations, on conformational properties of uridine and uridine 3'-phosphate and their sorption complexes with ribonuclease S are presented. It is shown that all favorable forms exist in *anti* conformation around glycosidic bond, *gauche-gauche* conformation of the exocyclic CH₂OH group and *trans*-orientation of phosphate in respect to C₃—C₄ bond.