



УДК 547.458.02:541.63

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ АНТИГЕННЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ
($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-ГЛЮКАНА И ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-ГАЛАКТАНА

Липкин Г. М., Кочетков Н. К.

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского
Академии наук СССР, Москва

В приближении модели атом-атомных взаимодействий проведен конформационный анализ ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана и ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактана. Найден оптимальные структуры полимеров. Выделены те конформации, в которых данные антигенные полисахариды способны взаимодействовать с антителами.

В настоящем сообщении изложены результаты теоретического конформационного анализа двух регулярных полисахаридов, в которых представлен тип связи $1 \rightarrow 6$: ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана (тип линейного декстрана) и ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактана. Интерес к указанным полисахаридам обусловлен двумя причинами. Во-первых, ни для декстрана, ни для галактана этого класса не получены рентгеноструктурные данные, которые позволили бы установить макромолекулярные структуры полимеров [1, 2], поэтому определение наиболее реальных по стереохимическим критериям конформаций данных полисахаридов является актуальной задачей. Во-вторых, оба эти полисахарида типа — и ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкан (декстран) и ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактан — обладают выраженной антигенной активностью. Так, в настоящее время выделено 8 миеломных иммуноглобулинов с анти-($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактановой активностью и 3 — с антидекстрановой активностью [3]. Для некоторых из указанных антител (X24, J539, W3129, QUPC52) проведен детальный анализ специфичности связывания [4–6]. Поэтому для того, чтобы понять строение антигенных центров этих полисахаридов, необходимо поиск связей между иммунологической специфичностью рассматриваемых макромолекул и данными конформационного анализа. Данная работа продолжает серию наших публикаций по конформациям антигенных полисахаридов [7, 8].

Конформационные параметры мономерных единиц рассматриваемых полисахаридов — углы вращения вокруг гликозидных связей Φ (C1—O1), Ψ (O1—C6) и углы вращения ω вокруг связей C5—C6. За начало отсчета углов принята *цис*-ориентация связей во фрагментах H1—C'1—O1—C6, C1—O1—C6—C5, O1—C6—H5; положительным считается вращение по часовой стрелке, если смотреть со стороны невозстанавливающего остатка. Геометрические параметры углеводных остатков приведены в работе [9]. Валентные углы гликозидных связей между остатками, соединенными по типу $1 \rightarrow 6$, равны $111,5^\circ$ [10]. При расчете потенциальной энергии учитывались невалентные и электростатические взаимодействия, водородные связи и торсионная энергия. Для функций невалентных взаимодействий взята параметризация из работы Скотта и Шераги [11], для остальных — из ра-

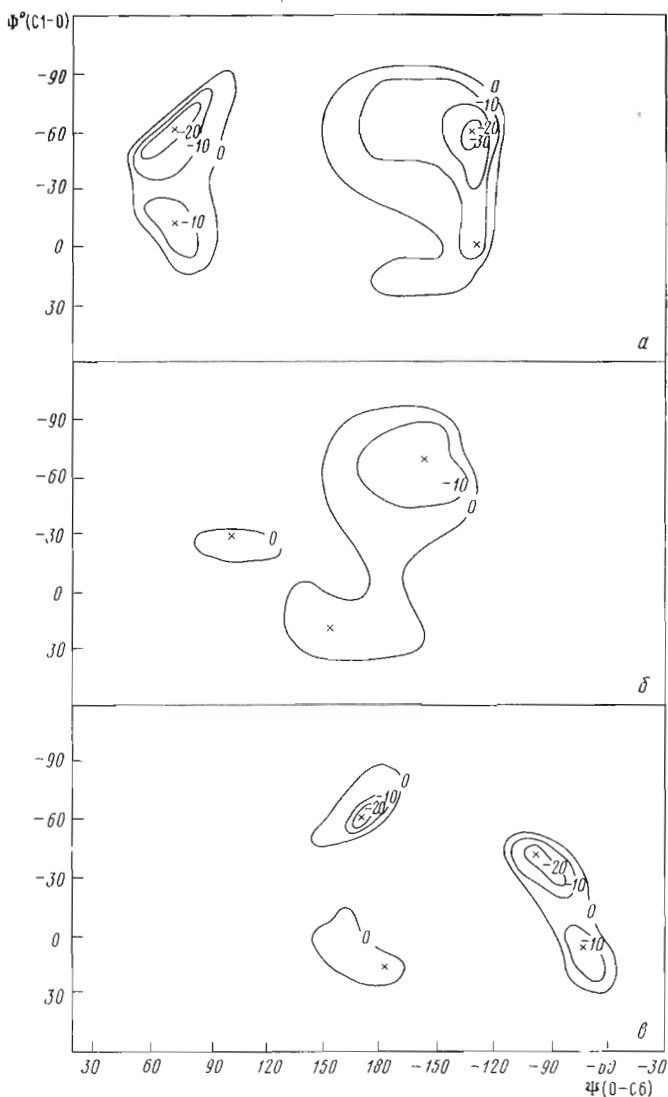


Рис. 1. Конформационные карты $\Phi(C1-O) - \Psi(O-C6)$ изомальтоглюкозы при значениях угла $\omega(C6-C5) - 60^\circ$ (*gt*) (*a*), 180° (*gg*) (*б*) и 60° (*tg*) (*в*)

боты [7]. В конформационном анализе углеводов внимание обычно акцентируется на экзоаномерном эффекте. Поскольку экспериментальные оценки величины аномерного и экзоаномерного эффектов в углеводах не превышают 1 ккал/моль [12], соответствующий потенциал в расчет не введен. Однако конформация α -глюкана, в которых $\Phi - 60-0^\circ$, и β -галактана, где $\Phi 60-0^\circ$, т. е. удовлетворительные по критерию экзоаномерного эффекта, специально оговариваются.

($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкан. Спиральные конформации ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана определены путем построения конформационных карт $\Phi(C-O) - \Psi(O-C)$ при трех значениях угла $\omega(C5-C6)$: 60° (*tg*), 180° (*gg*) и -60° (*gt*), соответствующих минимумам торсионного потенциала (рис. 1). Так как допустимые вариации углов Φ и Ψ находятся в пределах 100° , а для угла ω не исключено ни одно из указанных значений, рассмотрим отдельно три семейства структур, соответствующих *tg*-, *gg*- и *gt*-конформерам относительно связей $C5-C6$ остатков глюкозы. Результаты минимизации потенци-

Гесметрические и энергетические параметры оптимальных конформаций ($\alpha 1 \rightarrow 6$) *D*-глюкана

Номер конформации	Φ	Ψ	ω	U^* , ккал/моль	Экзономерный эффект ^{2*}	$U_{n,n+1}^{3*}$	$U_{n,n+2}$	$U_{n,n+3}$	$U_{n,n+4}$	$U_{n,n+5}$	Водородные связи		m^{4*}	$h, \text{Å}$
											остатки	атомы		
(I)	-57,8	-128,2	-57,4	-6,2	+	0	-5,8	-0,3	-0,1			—	2,0	2,2
(II)	-0,5	-128,6	-58,5	-4,2	+	+3,6	-2,4	-5,2	-0,2			—	2,9	1,5
(III)	-60,6	69,4	-60,5	-4,8	+	-1,5	-3,3				$n, n+2$	O2...O4	2,0	3,8
(IV)	-9,6	69,3	-60,7	-2,1	+	-1,8	-0,2	-0,1			$n, n+1$	O2...O5	2,0	4,3
(V)	-69,6	-155,7	178,8	-2,1	+	-1,8	-0,3					—	3,9	-3,9
(VI)	-25,1	95,9	180,2	-1,9	+	-1,7	-0,2				$n, n+1$	O2...O5	4,9	3,8
(VII)	25,4	145,3	176,5	-1,2	-	-1,2					$n, n+1$	O2...O5	2,9	4,8
(VIII)	-59,5	170,6	60,5	-5,4	+	-1,3	-0,2	-0,3	-3,2	-0,4	$n, n+4$	O4...O5	4,3	1,2
(IX)	-40,4	-100,2	61,0	-4,3	+	-0,7	-3,5	-0,1			$n, n+2$	O5...O4	2,8	-2,3
(X)	9,1	-60,4	62,0	-2,3	-	-2,0	-0,3				$n, n+1$	O5...O4	2,1	4,4
(XI)	25,6	169,7	61,4	-0,2	-	-0,2						—	5,6	-3,6

Примечания. * Общая энергия, приходящаяся на остаток в полимерной цепи. ^{2*} Знаком «+» отмечены спирали, в которых угол Φ удовлетворителен по экзономерному эффекту. ^{3*} Энергии межостаточных взаимодействий, n — номер остатка. ^{4*} m — число остатков в витке, h — трансляция остатка вдоль оси (отрицательные значения h соответствуют левым спиральям).

альной энергии ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана, а также параметры спиралей — число остатков в витке (m) и трансляция остатка вдоль оси (h), рассчитанные по алгоритму [13], даны в табл. 1.

В семействе *gt*-конформеров на энергетической поверхности имеется 4 локальных минимума (I—IV, табл. 1, рис. 1а). Значения угла Φ в них составляют -60 и 0° , т. е. удовлетворительны по критерию экзономерного эффекта. Спираль с углом $\Psi = -130^\circ$ (I и II) представляют собой компактные структуры с осями симметрии 2-го и 3-го порядка соответственно, в которых остатки соседних витков располагаются друг над другом на расстояниях ван-дер-ваальсовых контактов, т. е. имеет место внутримолекулярная плотная упаковка (рис. 2а). Энергия дисперсионных взаимодействий каждого 1-го и 3-го остатков вдоль цепи составляет в спирали (I) $-5,8$ ккал/моль, а 1-го и 4-го остатков в спирали II $-5,2$ ккал/моль. Водородных связей эти остатки между собой не образуют, и основной вклад в указанные величины вносят взаимодействия аксиальных атомов водорода, кольцевых атомов углерода, а также мостиковых метиленовых групп, т. е. неполярных группировок. Следовательно, согласно полученным данным, в водной среде может иметь место также гидрофобная стабилизация таких структур с меньшими значениями трансляций h на остаток (2,2 и 1,5 Å). Спираль (I) следует признать более вероятной не только потому, что спираль (II) весьма дестабилизирована на дисахаридных звеньях (см. табл. 1), но и по энтропийному фактору, так как форма потенциальной поверхности вблизи соответствующего ей локального минимума допускает более значительные колебания по углам Φ и Ψ .

В спиральях (III) и (IV) ($\Phi \sim 70^\circ$) ван-дер-ваальсовы взаимодействия углеводных остатков несущественны. Эти структуры стабилизированы водородными связями O2...O4 на трисахаридных звеньях (III) и O2...O5 на дисахаридных звеньях (IV, рис. 2б). Трансляция на остаток составляют 3,8 и 4,3 Å. Тем не менее конформация (III) входит в число самых предпочтительных для ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана. Наличие оси симметрии второго порядка обуславливает противоположную направленность гидроксильных групп соседних остатков относительно оси. Углеводные остатки структур (III) и (IV), располагающиеся приблизительно в одной плоскости, оптимальны для межмолекулярных взаимодействий. Поэтому в кристаллическом состоянии высока вероятность реализации конформаций (III)

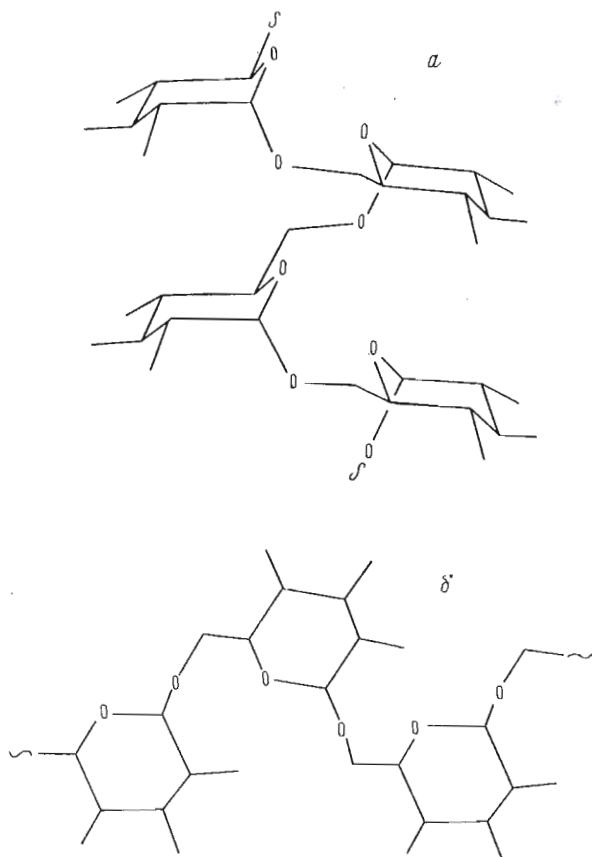


Рис. 2. Молекулярные модели ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана в конформациях (I) (а) и (IV) (б)

или (IV). Исходя из данных об аномальной вязкости декстрана, Эберт [14] пришел к выводу о существовании вторичной структуры декстрана и его большой склонности к межмолекулярной ассоциации. На основе модельных построений предложена структура полимера с осью 2-го порядка и водородными связями O2...O4 между остатками n и $n+2$, т. е. аналогичная спирали (III).

Конформеры gg по углу ω , представленные с подавляющим весом в структурах ди- и трисахаридов [10], в полимерной цепи обуславливают спирали, в которых отсутствуют какие-либо стабилизирующие взаимодействия между остатками (табл. 1). В конформациях (V) и (VI) число остатков на виток достигает 4 и 5. Поэтому идентично ориентированные гидроксильные группы оказываются на расстояниях, больших 16 Å. В спиральных данного семейства отсутствует четко выраженное распределение полярных групп во внешней, а неполярных групп — во внутренней области. По стереохимическим критериям в случае равенства угла ω 60° (tg) образование спиралей (VIII) и (IX) с 4 и 3 остатками на виток допустимо, но в очень узком диапазоне значений углов Φ , Ψ (~10°, рис. 1е), отклонения от которого приводят к значительным невалентным отталкиваниям атомов соседних витков. Поэтому реализация таких структур менее вероятна, чем структур (I—III). В спирали (VIII) трансляция минимальна, она составляет всего лишь 1,2 Å, и гидроксильные группы остатков в витке направлены во внешнюю сферу.

Конформационный анализ линейного декстрана приводит к заключению о возможном существовании спектра регулярных структур: от ком-

Геометрические и энергетические параметры оптимальных конформаций ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактана

Номер конформации	Φ	Ψ	ω	U , ккал/моль	Экзоаномерный эффект	$U_{n,n+1}$	$U_{n,n+2}$	$U_{n,n+3}$	$U_{n,n+4}$	$U_{n,n+5}$	Водородные связи		m	h , Å
						ккал/моль					остатки	атомы		
(I)	29,0	71,4	-67,2	-5,8	+	-1,2	-3,6	-0,9				—	2,2	-2,2
(II)	7,1	-83,7	-50,7	-3,0	+	-2,3	0,7				$n, n+1$	O2...O5	2,0	3,9
(III)	47,9	180,1	-61,3	-1,3	+	-1,0	-0,3				—	—	2,0	4,7
(IV)	-35,9	-140,1	-64,7	-0,9	+	-0,7	-0,2				$n, n+1$	O2...O5	2,7	-4,6
(V)	2,5	79,1	168,5	-4,8	-	-2,3	-2,4	-0,1			$n, n+1$	O5...O4	2,1	2,8
(VI)	29,8	-150,1	177,6	-1,5	+	-1,5					$n, n+1$	O2...O4	5,0	-3,6
(VII)	38,7	177,9	178,2	-1,8	+	-1,1	-0,1	-0,7	+0,3	-0,2		—	4,0	-1,7
(VIII)	-24,3	-161,8	-175,1	-2,4	+	-0,7	-0,1	-0,1	-0,1	-1,4		—	5,3	1,1
(IX)	51,0	137,7	61,7	-1,8	+	-1,6	-0,2				$n, n+1$	O5...O4	2,9	4,2
(X)	47,7	176,7	61,0	-1,0	+	-0,9	-0,1				—	—	3,7	4,2
(XI)	-32,8	179,7	60,2	-0,1	-	-0,1					—	—	2,2	5,8

пактных с величинами трансляции вдоль оси на остаток $h \sim 2$ Å до растянутых с $h \sim 4,5$ Å. В этом диапазоне спиральных параметров по критериям внутримолекулярных взаимодействий предпочтительны спирали, в которых на связях C5—C6 представлены *gt*-конформеры. В водной среде, а также в условиях повышенной влажности могут реализоваться более компактные структуры ($h \sim 2-3,5$ Å). В том случае, когда межмолекулярная ассоциация существенна, например в кристаллическом состоянии, весьма вероятны спирали с осью симметрии 2-го порядка и величинами h 4—4,5 Å, которые допускают образование эффективных водородных связей между цепочками. Невалентные взаимодействия обуславливают образование структур, оптимальных также по критерию экзоаномерного эффекта.

($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактан. Геометрические, энергетические и спиральные параметры ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактана представлены в табл. 2. Из 4 конформаций, в которых угол ω соответствует *gt*-конформерам, конформации (I) — (III) оптимальны по экзоаномерному эффекту ($\Phi < 0^\circ$). Указанные конформации практически различаются только значениями угла Ψ , которые близки к одному из минимумов торсионного потенциала для связи O1—C6. Спираль (I) — (III) имеют ось симметрии 2-го порядка, а величины трансляции равны 2,2; 3,9 и 4,7 Å, т. е. изменения угла Ψ вполне достаточны для перехода от компактных к растянутым структурам. В спирали (I) эффективны дисперсионные взаимодействия остатков, разделенных одним остатком, энергия взаимодействия составляет -3,6 ккал/моль. В такой конформации, весьма напоминающей конформацию (I) декстрана (см. выше), как бы имеет место образование «стоп» из углеводных остатков, гидроксильные группы которых направлены во внешнюю область.

Спираль (II) стабилизирована внутримолекулярными водородными связями O2...O5 между соседними остатками галактозы. Максимальная растянутость достигается в спирали (III) при *транс*-ориентации связей C1—O и C5—C6 ($\Psi \sim 180^\circ$). В отличие от ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-*D*-глюкана наличие *gg*-конформеров в случае ($\beta 1 \rightarrow 6$)-*D*-галактана может приводить к спиральям с 4 или 5 остатками на виток и малыми величинами трансляций h (VII и VIII, табл. 2). При минимизации потенциальной энергии полностью снять невалентные отталкивания между некоторыми атомами соседних витков не удастся, поэтому спирали (VII) и (VIII) не входят в число энергетически предпочтительных. Вместе с тем найденные геометрические параметры близки к тем, которые могут реализоваться в цикло($\beta 1 \rightarrow 6$) галактотетраозе и цикло($\beta 1 \rightarrow 6$) галактопентаозе. Спиральи семейства *tg*-конформеров характеризуются максимальными значениями трансляций, на-

пример в спирали (XI) h 5,8 Å, но эта структура проигрывает как по энергии невалентных взаимодействий, так и по критерию экзаномерного эффекта. Таким образом, из конформационного анализа ($\beta 1 \rightarrow 6$)-D-галактана следует, что для него, как и для ($\alpha 1 \rightarrow 6$)-D-глюкана, наиболее приемлемы структуры с двойной симметрией, в которых представлены *gt*-конформеры по углу ω .

Антигенные конформации декстрана и галактана. Анализ специфичности связывания антидекстрановыми иммуноглобулинами W3129 и QUPC 52 проведен путем ингибирования преципитации рядом производных изомальтозы [5, 6]. Показано, что локус связывания W3129 комплементарен изомальтопентаозе, а QUPC52 — изомальтогексаозе. Кроме того, определены вклады каждого остатка глюкозы в общую энергию ассоциации. Для антитела W3129 с терминальной специфичностью эти вклады (при нумерации остатков с невосстанавливающего конца) таковы: 1-го — 56%, 2-го — 0%, 3-го — 38%, 4-го — 0%, 5-го — 6%, 6-го — 0% [6], т. е. связывание определяется нечетными остатками. Далее, если модификации гидроксильных групп 1-го остатка, прежде всего при атоме C2, серьезно влияют на взаимодействия, то для 2-го остатка они несут незначительный вклад, т. е. его гидроксильные группы более удалены от активного центра в комплексе. Приведенные результаты естественно объяснить тем, что при взаимодействии с белком W3129 изомальтогексаоза находится в конформации с двойной симметрией и ориентирована на нем той стороной, в которой находятся гидроксильные группы нечетных остатков. Таким образом, фрагменты декстрана преципитируют IgA W3129 в конформации, которая является для полисахарида приемлемой и по расчетным данным, т. е. может принадлежать семейству *gt*-конформеров. Из оптимальных конформаций (I) и (III) активной следует признать конформацию (III), атомы которой более доступны для межмолекулярных взаимодействий, тогда как в конформации (I) соответствующие гидроксильные группы соседних витков находятся на расстояниях, близких сумме ван-дер-ваальсовых радиусов (рис. 2а). Конформации семейства *gg* или *tg* не могут удовлетворительно описать наблюдаемую специфику связывания гаптепов, так как из-за наличия осей симметрии высокого порядка направленность гидроксильных групп соседних остатков близка, что трудно согласовать с разительной разницей в энергиях связывания нечетных и четных остатков. Из геометрических параметров структуры (III) можно заключить, что взаимодействующий с антителом W3129 фрагмент декстрана имеет (с учетом ван-дер-ваальсовых радиусов) размеры $23 \times 12 \times 7$ Å³.

Детальное представление об энергетике и стереохимии связывания анти($\beta 1 \rightarrow 6$)-D-галактановых иммуноглобулинов X24 и J539 было получено при исследовании констант ассоциации с олигосахаридами, содержащими звенья β -D-Gal [4]. Показано, что полость связывания обоих антител простирается не более чем на 4 остатка. Для взаимодействия с гаптепом необходимо присутствие гидроксильных групп при атомах C2, C3 и C4 невосстанавливающего остатка. Вместе с тем идентичность констант ассоциации ($\beta 1 \rightarrow 6$)-D-галактобиозы и 6-O- β -D-галактозил-1,2:3,4-ди-O-изопропилиден- α -D-галактозы [15] свидетельствует о возможности замещения гидроксильных групп у остатка, следующего за невосстанавливающим остатком. В случае антитела J539, который значительно лучше связывает гаптеп, энергии взаимодействия с нечетными от невосстанавливающего конца остатками ниже, чем с четными остатками [4]. Характер связывания гаптепов позволяет выделить те конформации ($\beta 1 \rightarrow 6$)-D-галактана, в которых он взаимодействует с IgA X24 и J539. Наиболее вероятны структуры с осью симметрии 2-го порядка, с противоположной направленностью гидроксильных групп соседних остатков. Из них допустимы спирали со значительным шагом на остаток (4,5–5 Å), т. е. развернутые конформации (III) семейства *gt* или конформации (XI) семейства *tg*, являющиеся относительно высокоэнергетическими структурами. В ком-

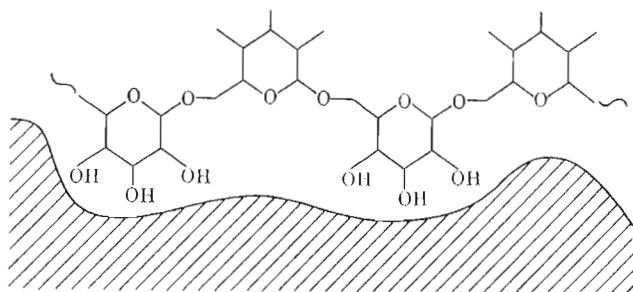


Рис. 3. Схематическая модель связывания $(\beta 1 \rightarrow 6)$ -*D*-галактана антителом

пактных структурах (I) (*gt*) или (V) (*gg*), оптимальных по внутримолекулярной энергии, взаимодействия между углеводными остатками n и $n+2$ (n — номер остатка) столь значительны, что препятствуют атомам C5 и O5 остатков $n+1$ участвовать в межмолекулярных контактах с антителом, которые также важны [4]. Структуры с осями симметрии высокого порядка (3–5) по отмеченным ранее соображениям не могут быть активными. Возможное расположение фрагмента $(\beta 1 \rightarrow 6)$ -*D*-галактана в активном центре антитела дано на рис. 3. В работе Глаудеманса и др. [4] выдвинута гипотеза, что белки X24 и J539 специфичны к терминальному певосстанавливающему концу галактана, однако необходимые доказательства отсутствуют. Вместе с тем модификации оксиметильной группы у атома C5 концевой галактозы допустимы. Поэтому при одностороннем связывании полисахарида возможно продолжение цепи на певосстанавливающем конце, т. е. $(\beta 1 \rightarrow 6)$ -*D*-галактан может иметь также внутренние иммунодоминанты. Размеры $(\beta 1 \rightarrow 6)$ -*D*-галактотетраозы в активной конформации составляют $20 \times 10 \times 8 \text{ \AA}^3$ и дают представление о форме активного центра иммуноглобулинов X24 и J539. Укажем, что в Fab-фрагменте иммуноглобулина McPC603 полость связывания имеет близкие размеры: 20 \AA в длину, 15 \AA в ширину и 12 \AA в глубину [16].

ЛИТЕРАТУРА

1. Jeanes A., Schieltz N. C., Wilham C. A. Molecular association dextran and in branched amyloseous carbohydrates.— J. Biol. Chem., 1948, v. 176, № 2, p. 617–627.
2. Ruckel E. R., Schuerch C. Chemical synthesis of a dextran model, poly- α -(1→6)-*D*-glucan.— Biopolymers, 1967, v. 5, № 4, p. 515–523.
3. Glaudemans C. P. J. The interaction of homogeneous murine myeloma immunoglobulins with polysaccharide antigens.— Adv. Carbohydr. Chem. Biochem., 1975, v. 31, p. 313–346.
4. Jolley M. E., Glaudemans C. P. J., Rudikoff S., Potter M. Structural requirements for the binding of derivatives of *D*-galactose to two homogeneous murine immunoglobulins.— Biochemistry, 1974, v. 13, № 15, p. 3179–3184.
5. Cisar J. O., Kabat E. A., Liao J., Potter M. Immunochemical studies on mouse myeloma proteins reactive with dextrans or with fructosans and on human antilevans.— J. Exptl Med., 1974, v. 139, p. 159–179.
6. Cisar J. O., Kabat E. A., Dorner M., Liao J. Binding properties of immunoglobulin combining sites specific for terminal or non-terminal antigenic determinants in dextran.— J. Exptl Med., 1975, v. 142, p. 435–459.
7. Липкин Г. М., Кочерков Н. К. Теоретический конформационный анализ специфических O-антигенных полисахаридов. I. O-антигенный полисахарид *Salmonella typhimurium*.— Биоорг. химия, 1980, т. 6, № 12, с. 1817–1829.
8. Липкин Г. М., Кочерков Н. К. Теоретический конформационный анализ специфических O-антигенных полисахаридов. II. O-антигенный полисахарид *Salmonella anatum*.— Биоорг. химия, 1981, т. 7, № 1, с. 111–122.
9. Arnott S., Scott W. E. Accurate X-ray diffraction analysis of fibrous polysaccharides containing pyranose rings. Part I. The linked-atom approach.— J. Chem. Soc., Perkin Trans. II, 1972, № 3, 324–335.
10. Tvaroska I., Perez S. S., Marchessault R. H. Conformational analysis of (1→6)- α -*D*-glucan.— Carbohydr. Res., 1978, v. 61, p. 97–106.

11. *Scott R. A., Scheraga H. A.* Conformational analysis of macromolecules. II. The rotational isomeric states of the normal hydrocarbons.— *J. Chem. Phys.*, 1966, v. 44, № 8, 3054–3068.
12. *Стоддар Дж.* Стереохимия углеводов. М.: Мир, 1975.
13. *Shimanouchi T., Mizushima S.* On the helical configuration of polymer chain.— *J. Chem. Phys.*, 1955, v. 23, № 4, p. 701–711.
14. *Ebert K. H.* Betrachtungen über den Zustand nativer Dextrane in Lösung unter Annahme einer Helix-Konformation.— *Monatsh. Chem.*, 1967, B. 98, № 3, 1128–1137.
15. *Glaudemans C. P. J., Zissis E., Jolley M. E.* Binding studies of a mouse-myeloma immunoglobulin A having specificity for β -D-(1–6)-linked D-galactopyranosyl residues.— *Carbohydr. Res.*, 1974, v. 40, 129–135.
16. *Segal D. M., Padlan E. A., Cohem G. H., Rudikoff S., Potter M., Davies D. R.* The three dimensional structure of a phosphorylcholinebinding mouse immunoglobulin Fab and the nature of the antigenbinding site.— *Proc. Nat. Acad. Sci. USA.*, 1974, v. 71, № 11, 4298–4302.

Поступила в редакцию
23.X.1980

CONFORMATIONAL ANALYSIS OF ANTIGENIC POLYSACCHARIDES (α 1–6)-D-GLUCAN AND (β 1–6)-D-GALACTAN

LIPKIND G. M., KOCHETKOV N. K.

*N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Academy
of Sciences of the USSR, Moscow*

Theoretical conformational analysis was carried out for (α 1–6)-D-glucan and (β 1–6)-D-galactan. The optimal structures were found and the conformations which allow these antigenic polysaccharides to interact with antibodies were distinguished.