

## AurB(Q96GD4) - VX680

Positions	Amino acid residues	ρ-value (этап 1)	ρ-value (этап 2)
77	F	0,491623	0,881523
78	E	0,276278	0,724508
79	I	0,491623	0,881523
80	G	0,124182	0,494836
81	R	0,491623	0,881523
82	P	0,124182	0,494836
83	L	0,000808367	0,00246614
84	G	0,0447474	0,114538
85	K	0,870093	0,988479
86	G	0,0131215	0,0381964
87	K	0,276278	0,494836
88	F	0,0447474	0,114538
89	G	0,0033502	0,0103339
90	N	0,276278	0,724508
91	V	0,0447474	0,114538
92	Y	0,0033502	0,0103339
93	L	0,0447474	0,26908
94	A	0,0033502	0,0103339
95	R	0,0447474	0,26908
96	E	0,870093	0,959544
97	K	0,491623	0,724508
98	K	0,996515	0,997123
99	S	0,870093	0,988479
100	H	0,870093	0,959544
101	F	0,870093	0,988479
102	I	0,870093	0,959544
103	V	0,0447474	0,114538
104	A	0,124182	0,26908
105	L	0,276278	0,724508
106	K	0,124182	0,26908
107	V	0,953961	0,997123
108	L	0,124182	0,26908
109	F	0,710112	0,988479
110	K	0,953961	0,997123
111	S	0,491623	0,881523
112	Q	0,710112	0,959544
113	I	0,710112	0,881523
114	E	0,491623	0,881523
115	K	0,276278	0,724508
116	E	0,276278	0,494836
117	G	0,491623	0,881523
118	V	0,710112	0,881523
119	E	0,124182	0,724508
120	H	0,124182	0,494836
121	Q	0,276278	0,724508
122	L	0,124182	0,494836
123	R	0,491623	0,881523
124	R	0,276278	0,494836

## Fig. 6B

125 E	0,0447474	0,26908
126 I	0,0131215	0,0103339
127 E	0,0447474	0,26908
128 I	0,870093	0,988479
129 Q	0,870093	0,997123
130 A	0,276278	0,494836
131 H	0,996515	0,999848
132 L	0,870093	0,959544
133 H	0,986222	0,988479
134 H	0,491623	0,881523
135 P	0,710112	0,959544
136 N	0,276278	0,494836
137 I	0,710112	0,881523
138 L	0,0131215	0,114538
139 R	0,0447474	0,26908
140 L	0,124182	0,26908
141 Y	0,0033502	0,114538
142 N	0,0447474	0,114538
143 Y	0,0033502	0,0381964
144 F	0,276278	0,724508
145 Y	0,276278	0,26908
146 D	0,870093	0,988479
147 R	0,124182	0,114538
148 R	0,953961	0,988479
149 R	0,124182	0,494836
150 I	0,276278	0,26908
151 Y	0,0447474	0,26908
152 L	0,710112	0,959544
153 I	0,0033502	0,0381964
154 L	0,953961	0,997123
155 E	0,0131215	0,0381964
156 Y	0,00017012	0,00246614
157 A	0,0131215	0,114538
158 P	0,0131215	0,114538
159 R	0,0447474	0,114538
160 G	0,124182	0,26908
161 E	0,491623	0,724508
162 L	0,124182	0,114538
163 Y	0,0447474	0,114538
164 K	0,491623	0,724508
165 E	0,710112	0,959544
166 L	0,124182	0,26908
167 Q	0,124182	0,494836
168 K	0,710112	0,959544
169 S	0,710112	0,959544
170 C	0,124182	0,114538
171 T	0,953961	0,959544
172 F	0,870093	0,959544
173 D	0,276278	0,881523
174 E	0,870093	0,997123

175 Q	0,0131215	0,26908
176 R	0,491623	0,959544
177 T	0,0447474	0,494836
178 A	0,0033502	0,0381964
179 T	0,276278	0,881523
180 I	0,124182	0,114538
181 M	0,0131215	0,0103339
182 E	0,276278	0,494836
183 E	0,870093	0,959544
184 L	0,276278	0,494836
185 A	0,491623	0,881523
186 D	0,491623	0,724508
187 A	0,870093	0,959544
188 L	0,276278	0,494836
189 M	0,0131215	0,0103339
190 Y	0,124182	0,26908
191 C	0,0447474	0,26908
192 H	0,710112	0,881523
193 G	0,953961	0,959544
194 K	0,0033502	0,0103339
195 K	0,124182	0,26908
196 V	0,953961	0,997123
197 I	0,710112	0,959544
198 H	0,953961	0,988479
199 R	0,999231	0,999848
200 D	0,999231	0,999848
201 I	0,999842	0,999996
202 K	1	1
203 P	1	1
204 E	0,996515	0,999848
205 N	1	1
206 L	0,996515	0,999341
207 L	0,999842	0,999996
208 L	0,999842	0,999996
209 G	0,124182	0,494836
210 L	0,710112	0,724508
211 K	0,710112	0,724508
212 G	0,953961	0,988479
213 E	0,710112	0,959544
214 L	0,986222	0,997123
215 K	0,000808367	0,00246614
216 I	0,00017012	0,000556574
217 A	3,98E-07	7,97E-07
218 D	0,0131215	0,0381964
219 F	0,0033502	0,0103339
220 G	0,0033502	0,0103339
221 W	0,0131215	0,114538
222 S	3,75E-05	0,0001251
223 V	0,491623	0,959544
224 H	0,491623	0,959544

225 A	0,124182	0,26908
226 P	0,124182	0,724508
227 S	0,953961	0,997123
228 L	0,491623	0,724508
229 R	0,870093	0,988479
230 R	0,710112	0,959544
231 K	0,491623	0,724508
232 T	0,953961	0,997123
233 M	0,0131215	0,0381964
234 C	0,986222	0,999848
235 G	0,996515	0,999848
236 T	0,999231	0,999968
237 L	0,276278	0,724508
238 D	0,870093	0,988479
239 Y	0,999231	0,999968
240 L	0,710112	0,959544
241 P	0,491623	0,881523
242 P	0,999231	0,999968
243 E	0,999231	0,999968
244 M	0,491623	0,881523
245 I	0,953961	0,997123
246 E	0,870093	0,988479
247 G	0,870093	0,988479
248 R	0,710112	0,988479
249 M	0,0131215	0,0381964
250 H	0,124182	0,26908
251 N	0,491623	0,494836
252 E	0,491623	0,881523
253 K	0,870093	0,988479
254 V	0,276278	0,494836
255 D	0,710112	0,881523
256 L	0,124182	0,26908
257 W	0,491623	0,724508
258 C	0,986222	0,999341
259 I	0,491623	0,724508
260 G	0,491623	0,724508
261 V	0,276278	0,494836
262 L	0,0131215	0,0381964
263 C	0,0033502	0,114538
264 Y	0,953961	0,997123
265 E	0,124182	0,494836
266 L	0,710112	0,881523
267 L	0,953961	0,988479
268 V	0,870093	0,988479
269 G	0,999842	0,999996
270 N	0,986222	0,997123
271 P	0,996515	0,999341
272 P	0,999842	0,999996
273 F	0,999965	1
274 E	0,491623	0,881523

275 S	0,953961	0,997123
276 A	0,124182	0,26908
277 S	0,870093	0,959544
278 H	0,710112	0,881523
279 N	0,276278	0,494836
280 E	0,491623	0,724508
281 T	0,491623	0,881523
282 Y	0,491623	0,881523
283 R	0,710112	0,881523
284 R	0,710112	0,881523
285 I	0,986222	0,997123
286 V	0,999231	0,999341
287 K	0,491623	0,724508
288 V	0,276278	0,494836
289 D	0,996515	0,999341
290 L	0,986222	0,988479
291 K	0,996515	0,997123
292 F	0,710112	0,724508
293 P	0,491623	0,724508
294 A	0,710112	0,724508
295 S	0,870093	0,881523
296 V	0,491623	0,724508
297 P	0,124182	0,26908
298 M	0,0131215	0,0103339
299 G	0,491623	0,881523
300 A	0,870093	0,959544
301 Q	0,996515	0,997123
302 D	0,953961	0,988479
303 L	0,953961	0,988479
304 I	0,953961	0,988479
305 S	0,710112	0,959544
306 K	0,710112	0,494836
307 L	0,710112	0,959544
308 L	0,870093	0,988479
309 R	0,276278	0,494836
310 H	0,276278	0,494836
311 N	0,491623	0,724508
312 P	0,491623	0,724508
313 S	0,870093	0,959544
314 E	0,124182	0,26908
315 R	0,710112	0,959544
316 L	0,870093	0,959544
317 P	0,276278	0,494836
318 L	0,491623	0,881523
319 A	0,276278	0,494836
320 Q	0,491623	0,724508
321 V	0,710112	0,724508
322 S	0,491623	0,494836
323 A	0,710112	0,724508
324 H	0,870093	0,959544

325 P	0,491623	0,724508
326 W	0,996515	0,999341
327 V	0,986222	0,997123