

ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗНАЧИМЫЕ АМИНОКИСЛОТНЫЕ МОТИВЫ БЕЛКОВ ТЕПЛООВОГО ШОКА:
СТРУКТУРНЫЙ И БИОИНФОРМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ HSP60/HSP10 ПЯТИ КЛАССОВ ХОРДОВЫХ

Тихомирова Т.С., Галзйтская О.В.

Молекулярная биология

Пояснения к таблицам

Supplementary_OligHsp60

LEU22	Серым цветом выделены неструктурированные аминокислотные остатки, определенные с помощью программы FoldUnfold
2,05	Alkyl / Pi-alkyl - взаимодействие между СН-группами (гидрофобное взаимодействие) или между СН-донором и pi-акцепторными группами (слабая водородная связь) боковых цепей аминокислот.
2,05	Carbon - тип слабой водородной связи между атомом водорода при атоме углерода и атомом кислорода боковой цепи
2,05	Salt / charge-charge - солевые мостики и электростатическое взаимодействие
2,05	H-H - водородная связь

Supplementary_PID

Цветовая шкала

PID% (основные цвета)



PID% (градиент)



Формула расчета PID

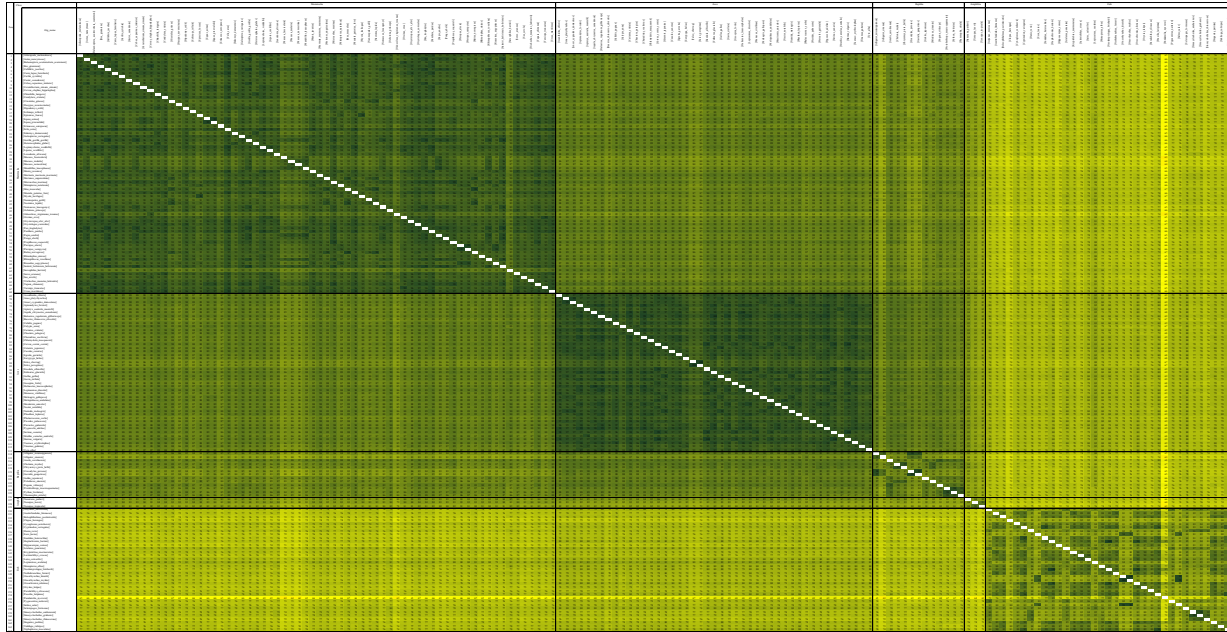
$$PID\% = (N_{\text{эkv}} \times 100\%) / (N_1 + N_2 - N_{\text{эkv}})$$

$N_{\text{эkv}}$ - количество эквивалентных выровненных позиций, не содержащих штрафа за делецию (non-gap позиции),

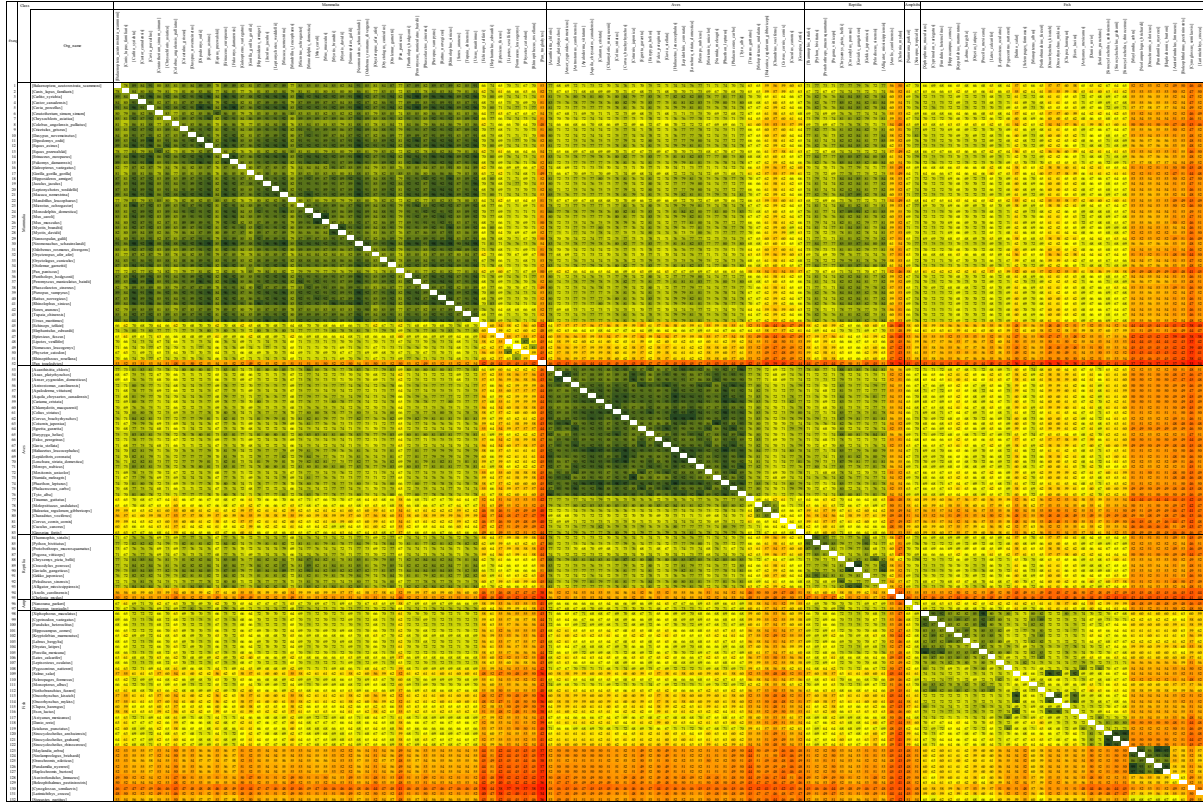
N_1 и N_2 – длина сравниваемых последовательностей.

Supplementary_PID

Hsp60



Supplementary_PID
Hsp10



№AK	1	2	3	4	5	6	6	6	6	7	7	7	8	9	9	9	10	11	11	12	12	13	14	15	16	16	17	18	19	20	21	21				
Субъединица_1 / Субъединица_2	LEU22	ALA26	VAL29	PRO33(O)	LYS34(NZ)	ARG36(CD)	ARG36(NH1)	ARG36(NH2)	ARG36	THR37(N)	THR37(O)	THR37(OG1)	VAL38	ILE39(N)	ILE39(O)	ILE39	ILE40	GLU41(N)	GLU41(OE1)	SER46(CB)	SER46(OG)	PRO47	VAL49	ILE60	ASP61(O)	ASP61(OD2)	LYS63	ASN153(O)	ASP155(OD2)	THR385(OG1)	GLU389(OE1)	GLU389(OE2)				
1	GLY1(N)																								2,9											
2	ALA3																									4,5										
3	LYS4(N)																																			
4	VAL6	5,3																																		
5	PHE8		5,3																																	
6	LYS65(NZ)																																			
7	ILE69															5,2																				
8	LEU73																																			
9	ASP76(OD1)																																			
9	ASP76(OD2)																																			
10	SER108(O)																																			
11	LYS109(O)																																			
12	ALA111(O)																																			
13	ASN112(ND2)																																			
14	PRO113																																			
15	ARG117(NH1)																																	5,3		
15	ARG117(NH2)																																	2,9		
16	ARG118(NH2)																																	2,8	5,3	
17	ASP436(OD2)																																			
18	ASP507(CA)																																		3,6	
19	LEU514																																		4,4	
20	THR517(O)																																		3,1	
20	THR517(OG1)																																		2,5	
21	ALA518																																		4,5	
22	GLU519(N)																																		2,9	
22	GLU519(OE1)																																		3,6	2,9
23	VAL520(O)																																		3,1	
23	VAL520																																		4,5	
24	VAL521																																		4,8	
25	VAL522(N)																																		2,9	
25	VAL522																																		4,9	
26	GLU524(N)																																		3,1	

Примечание. В ячейках карты указана длина соответствующей связи.