

ПРИЛОЖЕНИЕ

К статье А.А. Анашкиной, Е.Н. Кузнецова, А.В. Батяновского, Л.А. Урошлева, В.Г. Туманяна, Н.Г. Есиповой «Взаимодействия белок-ДНК: статистический анализ межатомных контактов в большой и малой бороздках»

Наиболее частые контакты атомов аминокислот с атомами нуклеиновых оснований в малой бороздке ДНК

Атомы	DA_N3	DA_C2	DT_O2	DG_N3	DG_N2	DC_O2	Сумма
ALA_CB	89	81	132	172	261	222	957
ALA_O	33	33	88	91	142	150	537
ARG_NH1	1263	949	1187	606	799	731	5535
ARG_NH2	1132	872	1415	645	988	958	6010
ASN_CB	174	101	172	114	147	99	807
ASN_ND2	284	348	354	191	378	252	1807
ASN_OD1	166	115	216	91	193	140	921
ASP_OD1	18	11	49	38	144	37	297
ASP_OD2	28	16	82	73	137	43	379
CYS_SG	26	41	19	13	20	11	130
GLN_NE2	111	100	108	203	250	212	984
GLN_OE1	75	61	74	203	251	149	813
GLU_OE1	47	73	47	37	109	47	360
GLU_OE2	37	40	77	49	137	86	426
GLY_CA	213	198	359	224	289	259	1542
HIS_NE2	181	136	248	75	116	77	833
ILE_CD1	109	92	150	142	124	177	794
LEU_CD1	215	256	288	110	108	98	1075
LEU_CD2	145	126	174	122	137	165	869
LYS_NZ	542	559	735	331	566	434	3167
MET_CE	66	73	155	99	117	78	588
MET_SD	49	45	167	90	81	43	475
PHE_CE1	221	182	226	104	182	173	1088
PHE_CZ	248	213	265	155	170	160	1211
PRO_CB	104	84	168	60	45	62	523
PRO_CD	117	97	138	57	50	55	514
PRO_CG	216	129	200	110	84	94	833
SER_OG	107	126	191	144	201	113	882
THR_CG2	137	110	236	60	111	123	777
THR_OG1	117	91	202	70	100	125	705
TRP_CE3	12	13	13	25	47	55	165
TRP_CH2	21	10	81	23	12	23	170
TYR_OH	163	169	384	186	360	233	1495
VAL_CG1	318	308	264	66	65	133	1154
VAL_CG2	249	205	209	86	114	130	993
Сумма	7033	6063	8873	4865	7035	5947	

Наиболее частые контакты атомов аминокислот с атомами нуклеиновых оснований в большой бороздке ДНК

Атомы	DA_N6	DA_N7	DA_C8	DT_O4	DT_C5	DT_C6	DG_O6	DG_N7	DG_C8	DC_N4	DC_C5	DC_C6	Сумма
ALA_CB	423	293	262	588	242	224	235	448	463	311	374	275	4138
ARG_CZ	523	544	521	851	806	675	695	1057	844	694	729	628	8567
ARG_NE	579	524	542	833	324	542	949	1418	727	411	628	548	8025
ARG_NH1	1166	1002	883	1718	1061	1170	3325	3569	2036	2088	995	800	19813
ARG_NH2	1896	1266	992	2274	1077	1232	3989	4242	2081	2763	1222	1010	24044
ASN_ND2	842	801	576	679	188	295	484	576	427	518	392	269	6047
ASN_OD1	777	693	211	602	171	212	337	343	263	547	385	201	4742
ASP_OD1	228	118	81	171	65	67	307	167	57	619	499	151	2530
ASP_OD2	398	190	104	397	180	102	525	177	121	1201	990	141	4526
CYS_SG	64	69	57	100	22	62	62	138	60	119	143	47	943
GLN_NE2	699	599	436	652	244	267	441	498	388	526	412	308	5470
GLN_OE1	707	553	212	698	225	249	454	402	338	539	450	271	5098
GLU_OE1	292	262	155	427	85	97	311	110	150	894	527	137	3447
GLU_OE2	268	179	116	328	86	103	251	154	203	721	633	240	3282
GLY_CA	267	316	307	431	175	169	297	426	341	363	280	206	3578
GLY_N	185	191	156	262	55	257	275	198	96	251	142	218	2286
GLY_O	146	131	102	327	134	133	138	189	218	360	305	114	2297
HIS_CD2	114	135	128	171	115	120	186	198	144	294	219	82	1906
HIS_CE1	187	216	135	201	129	132	342	291	160	303	286	269	2651
HIS_ND1	80	190	197	154	108	106	169	169	99	173	276	189	1910
HIS_NE2	199	161	112	201	124	134	336	335	199	293	276	139	2509
ILE_CD1	234	241	215	254	112	136	238	197	316	365	342	300	2950
ILE_CG2	103	223	255	171	77	89	96	181	221	121	225	260	2022
LEU_CD1	259	235	204	295	258	308	154	144	132	189	190	116	2484
LEU_CD2	256	153	161	304	219	361	142	173	167	167	194	175	2472
LYS_NZ	919	765	594	905	138	182	1770	1729	680	865	314	298	9159
MET_CE	160	143	121	197	112	139	80	125	103	71	88	98	1437
MET_SD	147	132	78	206	155	142	31	113	121	36	83	83	1327
PHE_CE1	140	182	181	210	297	273	145	144	166	108	147	170	2163
PHE_CE2	150	151	150	213	276	281	182	168	159	176	119	138	2163
PHE_CZ	137	162	188	190	299	318	141	142	199	187	190	186	2339
PRO_CB	172	133	167	328	86	82	82	55	70	103	127	53	1458
PRO_CG	247	160	234	388	195	128	95	122	119	64	90	116	1958
SER_CB	310	428	417	485	253	393	304	376	380	312	308	274	4240
SER_OG	449	630	861	638	334	864	380	829	935	387	625	536	7468
THR_CG2	617	469	363	489	219	349	261	399	384	415	416	219	4600
THR_OG1	481	532	531	400	232	623	268	439	488	397	564	332	5287
TRP_CZ2	47	92	85	75	105	159	37	67	73	102	227	160	1229
TYR_CE1	140	196	195	193	197	329	105	192	280	302	424	270	2823
TYR_CE2	150	240	202	256	246	388	139	228	300	318	347	280	3094
TYR_OH	375	319	368	439	220	502	243	363	486	452	415	309	4491
VAL_CG1	183	251	220	324	121	136	127	219	207	154	226	201	2369
VAL_CG2	261	198	233	334	111	87	125	180	191	150	202	158	2230
Сумма	15977	14468	12308	19359	9878	12617	19253	21690	15592	19429	16026	10975	