

ПРИЛОЖЕНИЕ

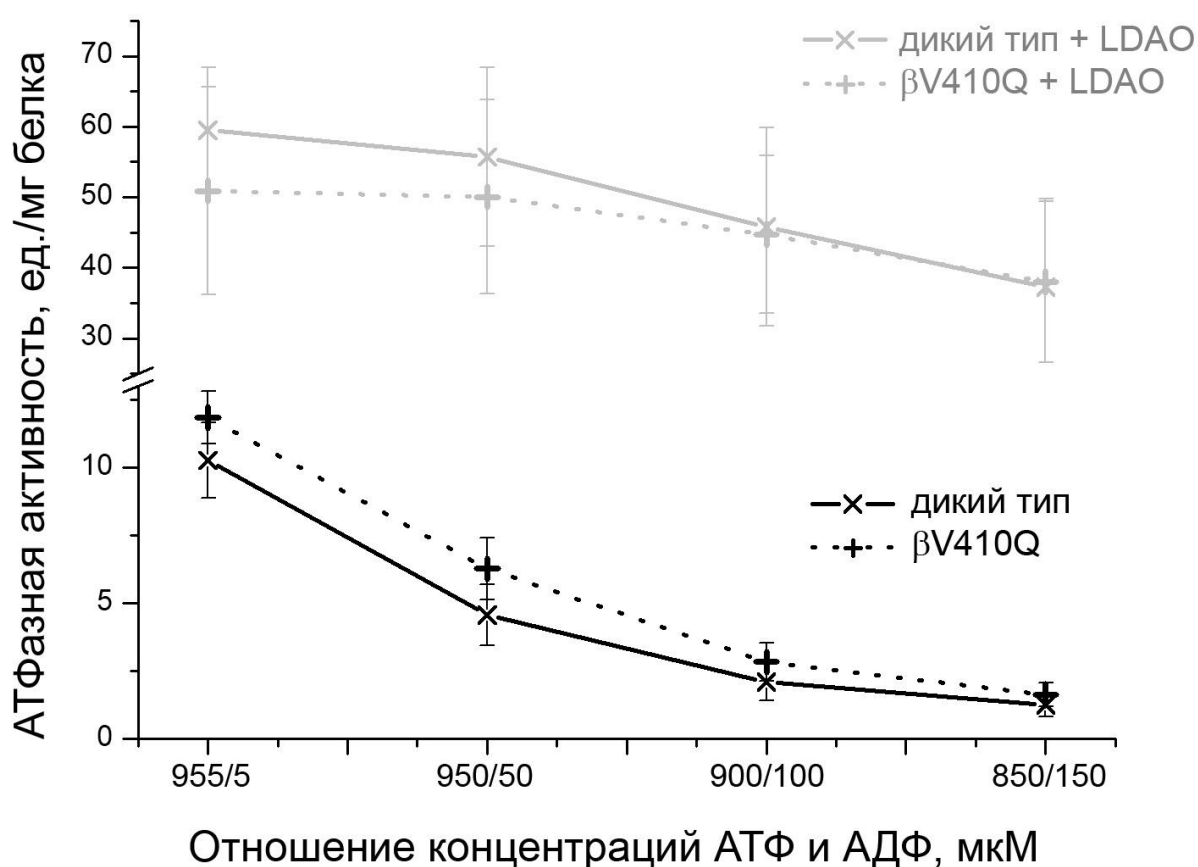


Рисунок П1. Влияние детергента LDAO на АТФазную активность субкомплекса F_1 *E. coli* в присутствии АДФ.

Измерения проводились по сопутствующему гидролизу АТФ за кислению среды с помощью рН-индикатора фенолового красного в буфере, содержащем 2 мМ HEPES-NaOH, рН 8.0, 100 мМ KCl, 1 мМ $MgCl_2$, 30 мкМ фенолового красного. Концентрация EF_1 составляла 7,5 мкг/мл. Ответ индикатора регистрировали как изменение оптической плотности при длине волны 560 нм, скорректированной по оптической плотности в изобестической точке (477 нм). Калибровка проводилась в каждом образце трехкратным добавлением NaOH до 100 мкМ. Активность вычислялась исходя из предположения, что гидролиз 1 молекулы АТФ приводит к высвобождению 1 иона H^+ . Показано среднее из трех повторов и стандартное отклонение. Обратите внимание на разрыв оси у.

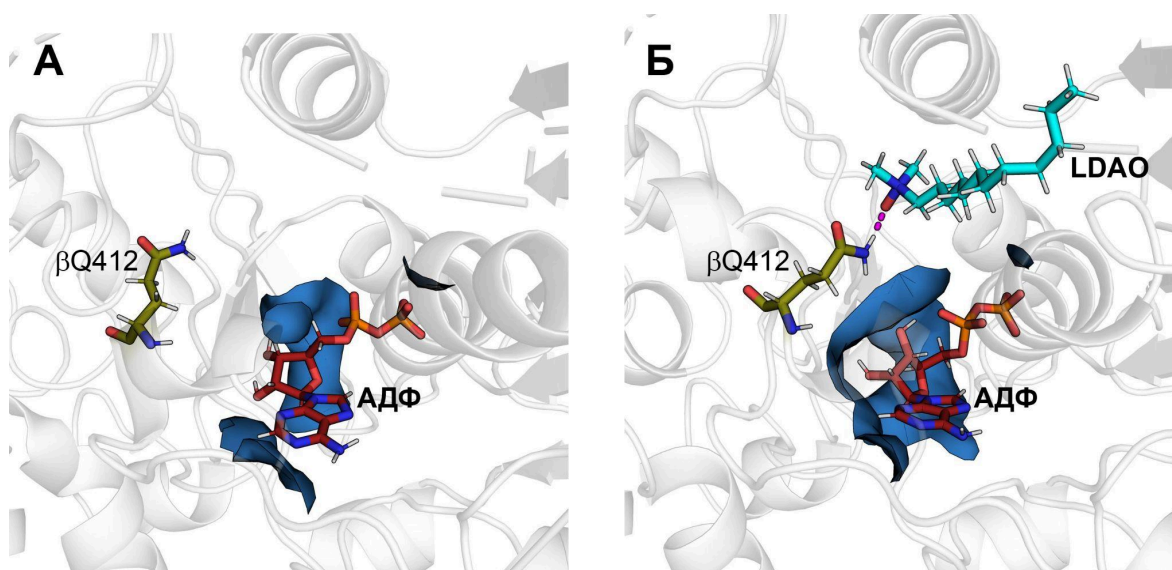


Рисунок П2. Кадры из молекулярной динамики фрагмента субкомплекса $F_1 C$ *thermarum*. Сравнение площади контакта связанного в каталитическом центре АДФ с окружающей фермент водной фазой в исходном (А, без LDAO) и “приподнятом” (Б, в присутствии LDAO) положении петли $\beta 407-418$. Поверхность, экспонированная в водную фазу, выделена синим цветом и составляла $\sim 23 \text{ \AA}^2$ в исходном (А, без LDAO) и $\sim 40 \text{ \AA}^2$ в “приподнятом” (Б, в присутствии LDAO) состояниях. Малиновым пунктиром на панели Б обозначена водородная связь, возникавшая в ходе симуляции между боковой цепью остатка $\beta Q412$ и кислородом LDAO (угол 169 градусов, расстояние между кислородом LDAO и азотом глутамина 3 $\text{\AA}$).

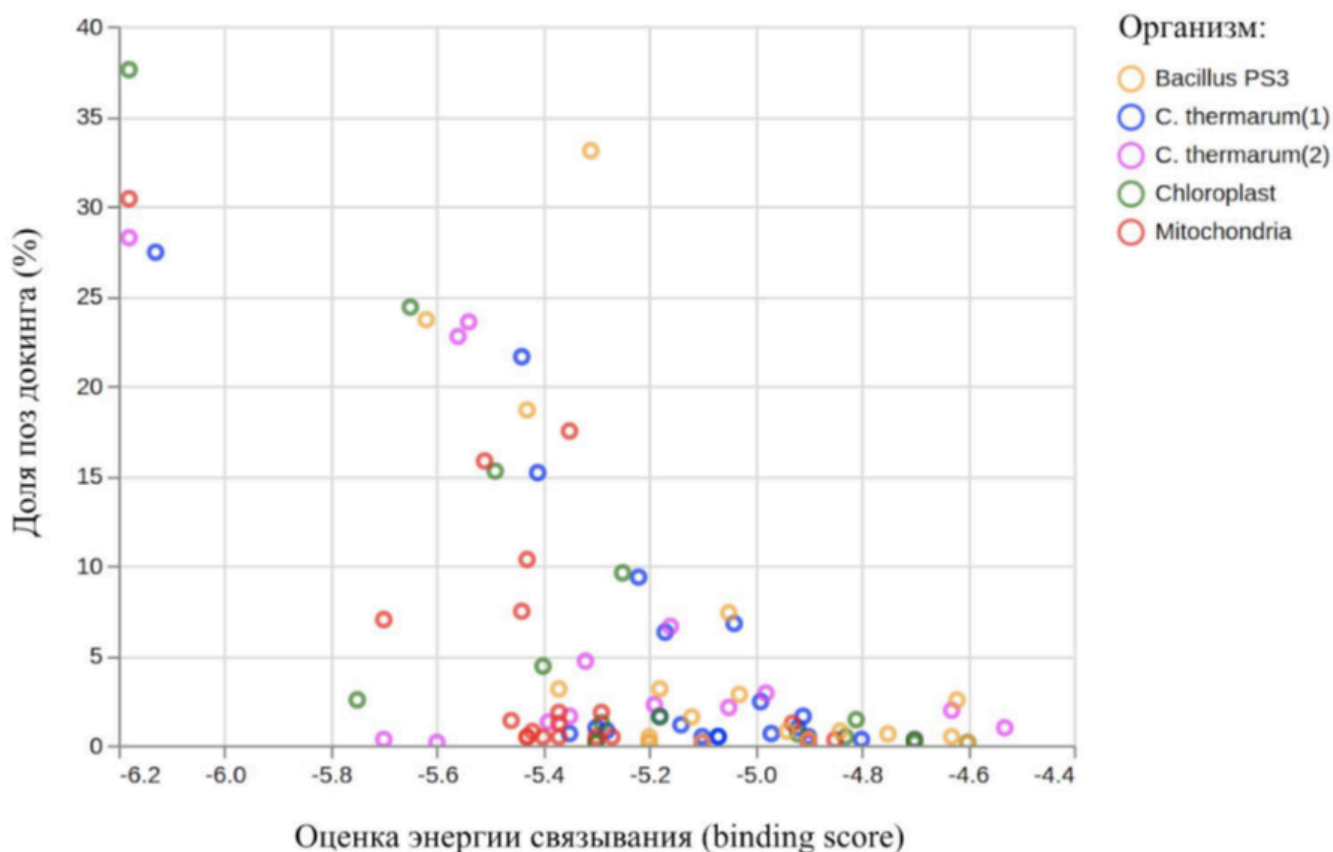


Рисунок ПЗ. Результаты докинга LDAO на структурах $\alpha_3\beta_3\gamma$ -субкомплексов без нуклеотидов. По оси x отложена средняя энергия связывания, по оси y процент поз для найденных кластеров поз LDAO, соответствующих возможным местам связывания с $\alpha_3\beta_3\gamma$ -субкомплексами из термофильной бактерии *Bacillus* sp. штамм PS3 (PDB ID: 6N2Y), алкалифильной бактерии *Caldalkalibacillus thermarum* (PDB ID: 5HKK, 5IK2), хлоропластов шпината *Spinacia oleracea* (PDB ID: 6FKF) и митохондрий сердца быка *Bos taurus* (PDB ID: 1E79). Каждая точка соответствует одному кластеру поз, точки окрашены в соответствии со структурой. Чем ниже оценка энергии связывания (binding score), тем, согласно предсказанию, сильнее связывается LDAO в данном месте. Чем больше поз попало в кластер, тем доступнее он для лиганда.

4 точки в диапазоне оценки binding score от -6.2 до -6.0 соответствуют кластерам поз, которые располагаются в каталитическом центре в закрытой конформации.

Таблица П1. Результаты докинга LDAO в $\alpha\beta$ -димер бактерии *C. thermarum*

Таблица содержит аминокислотные остатки *C. thermarum* (PDB ID: 5HKK), которые по результатам докинга находятся на расстоянии менее 4Å от поз LDAO. Докинг проводился программой PLANTS в открытую и закрытую конформации каталитического центра, сформированного субъединицами α и β , в присутствии нуклеотидов из оригинальной структуры.

Система	Контактировавшие остатки из субъединицы α	Контактировавшие остатки из субъединицы β
Структура фермента термоалкалифильной бактерии <i>C. thermarum</i> , закрытая конформация	Ser141-Val142, Arg365-Gly367, Ala369	Thr158-Val159, Gln162, Arg186-Leu191, Glu194, His408-Phe413
Структура фермента термоалкалифильной бактерии <i>C. thermarum</i> , полузакрытая конформация	Met156-Pro158, Ile168, Val326, Ile335, Gln341, Phe343, Gly360-Ala369, Gly380-Leu384, Ala387	Ala153-Val155, Gln162-Glu163, Ile165-Asn166, Arg186-Glu187, Asp190-Leu191, Glu194, Arg326, Ala329-Gly332, Tyr334, His408-Val409, Gln412, Thr414, Met416, Tyr447- Met448