

Приложение к статье Мамчур А.А. и соавт. «Изучение конформационной подвижности липид-связывающего сайта изоформ $\epsilon 2$, $\epsilon 3$, $\epsilon 4$ аполипопротеина Е методом молекулярной динамики». *Вестн. Моск. ун-та. Сер. 16. Биол./Lomonosov Biol. J.* 2023;78(2):00–00.

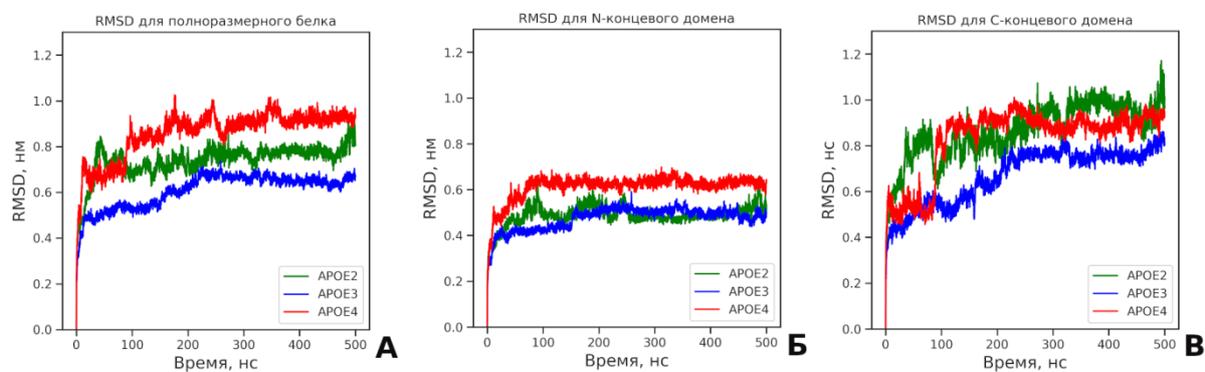


Рис. 1. Приложение. Среднеквадратичное отклонение атомов (RMSD) для полноразмерного белка (А), N-концевого домена (Б) и C-концевого домена (В) различных изоформ АпоЕ.

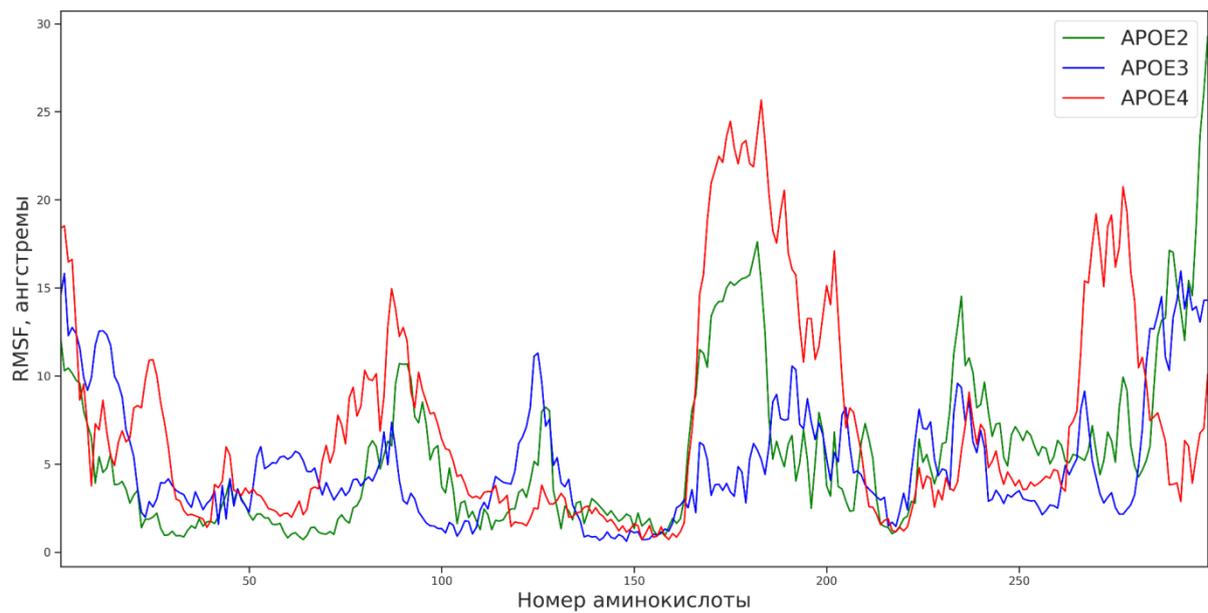


Рис. 2. Приложение. Среднеквадратичное колебание (RMSF) альфа-углеродов аминокислот различных изоформ АпоЕ.

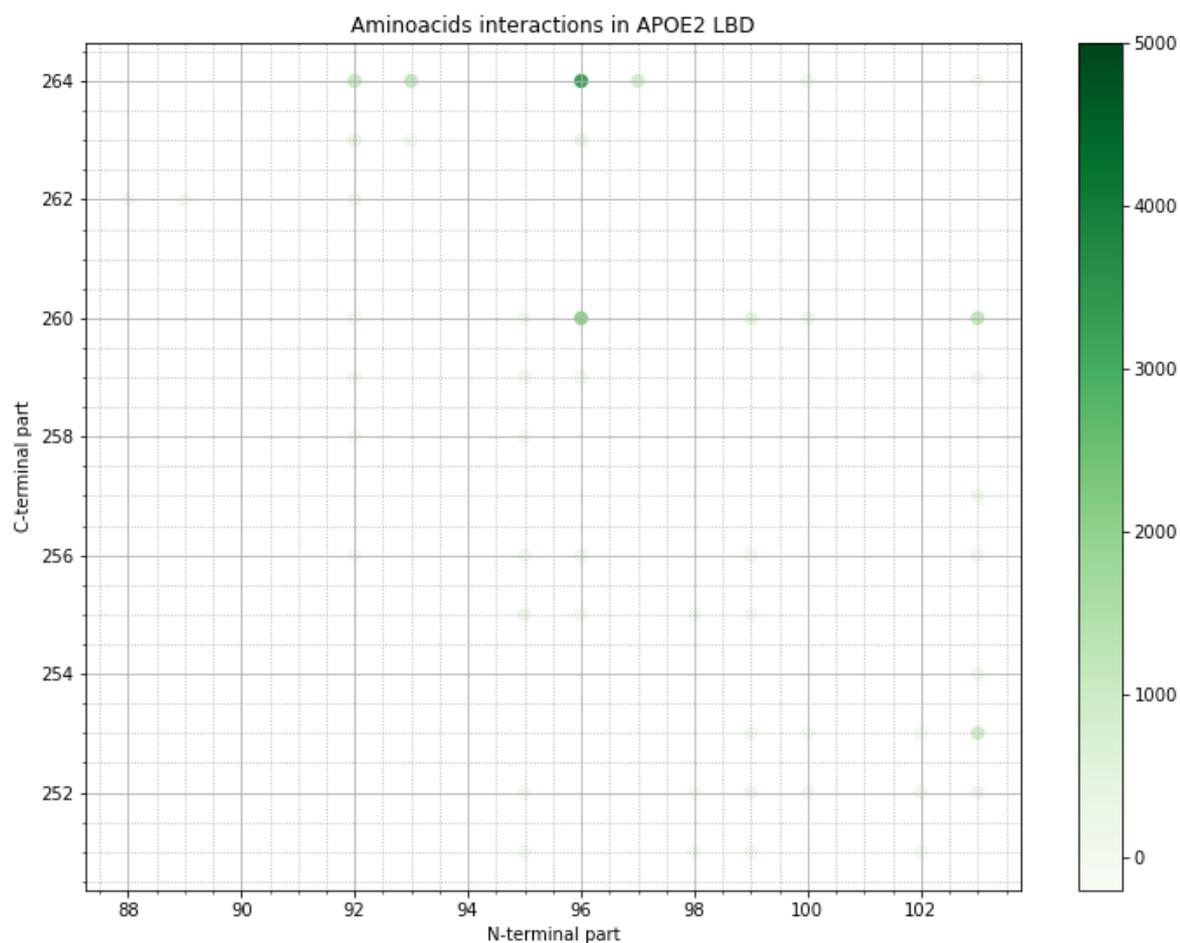


Рис. 3. Приложение. Карта контактов в липид-связывающем сайте изоформы АРОЕ2. По осям отложены номера аминокислот. Цветовая шкала отражает длительность контакта (в количестве фреймов траектории). *Примечание:* наличие контактов записывалось с шагом в 100 пс.

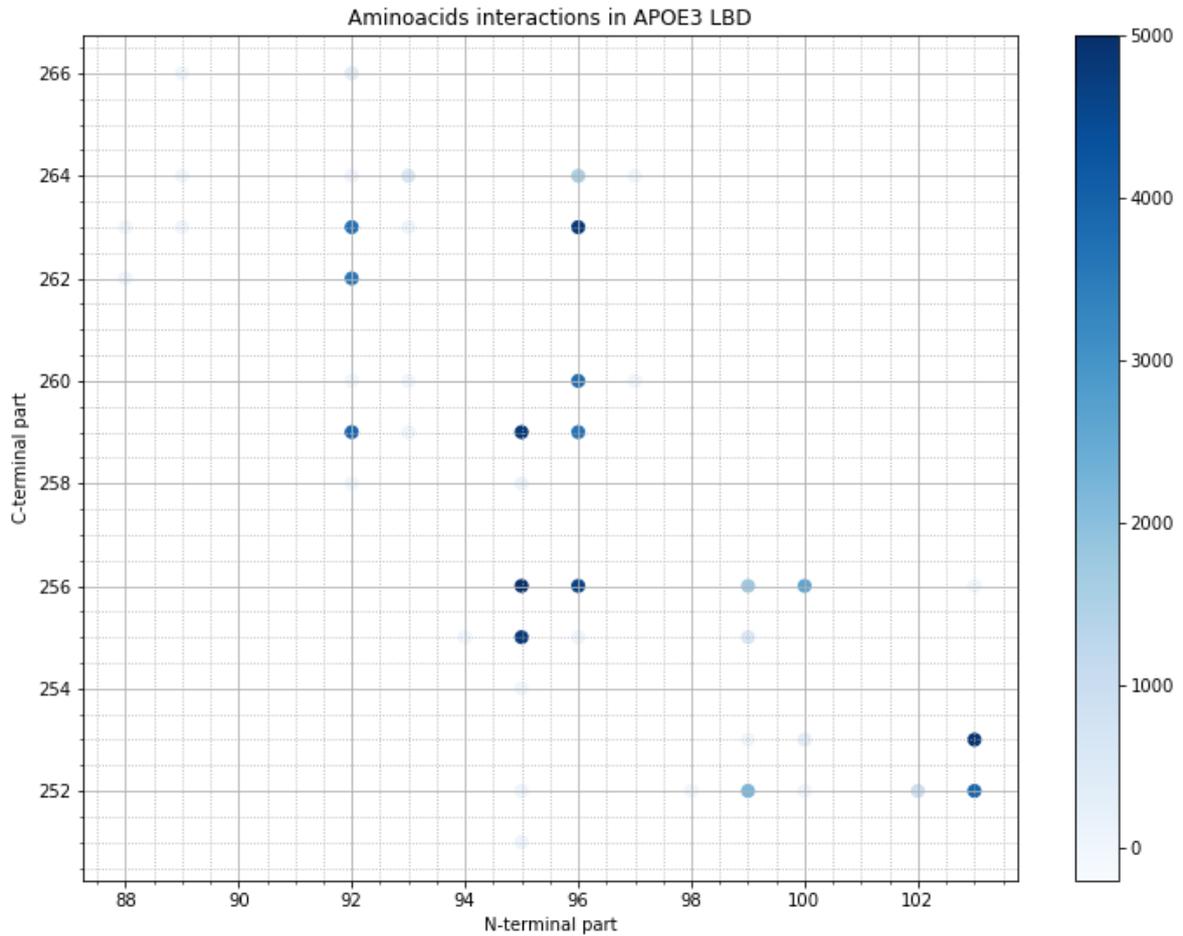


Рис. 4. Приложение. Карта контактов в липид-связывающем сайте изоформы АР0Е3. По осям отложены номера аминокислот. Цветовая шкала отражает длительность контакта (в количестве фреймов траектории). *Примечание:* наличие контактов записывалось с шагом в 100 пс.

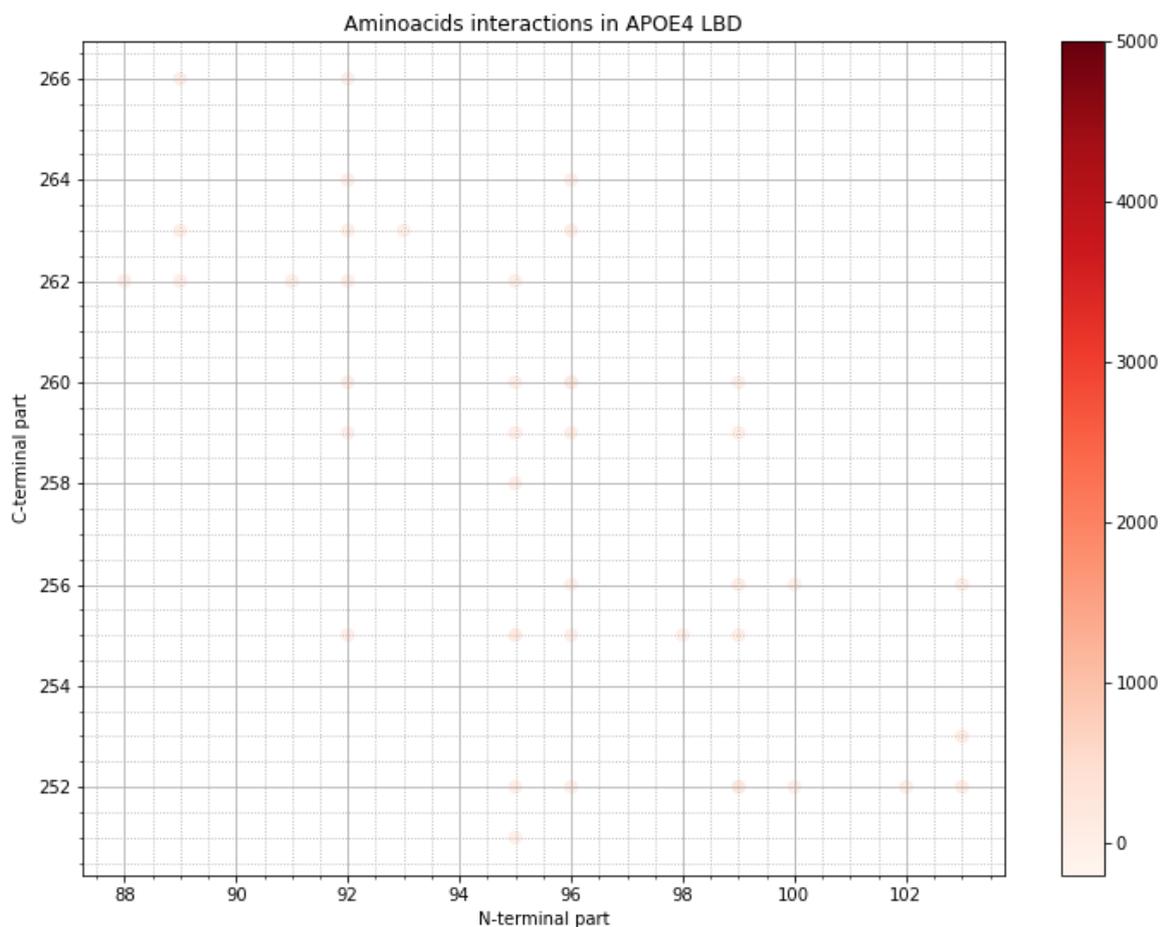


Рис. 5. Приложение. Карта контактов в липид-связывающем сайте изоформы АРОЕ4. По осям отложены номера аминокислот. Цветовая шкала отражает длительность контакта (в количестве фреймов траектории). *Примечание:* наличие контактов записывалось с шагом в 100 пс.

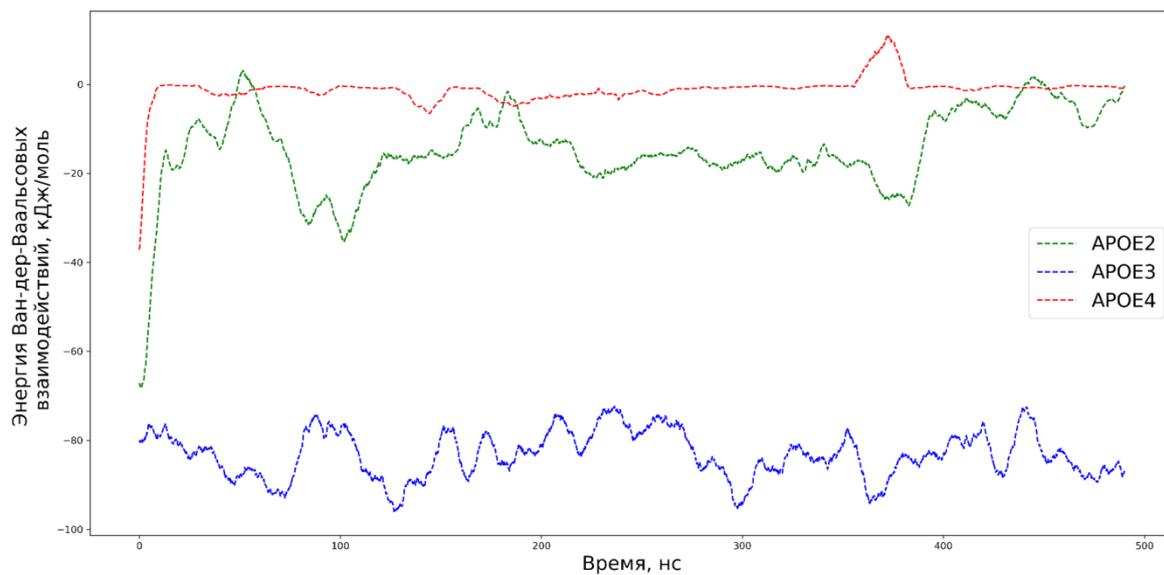


Рис. 6. Приложение. Скользящее среднее для энергии Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между N- и C-концевой α -спиралями липид-связывающего сайта изоформ АпоЕ.

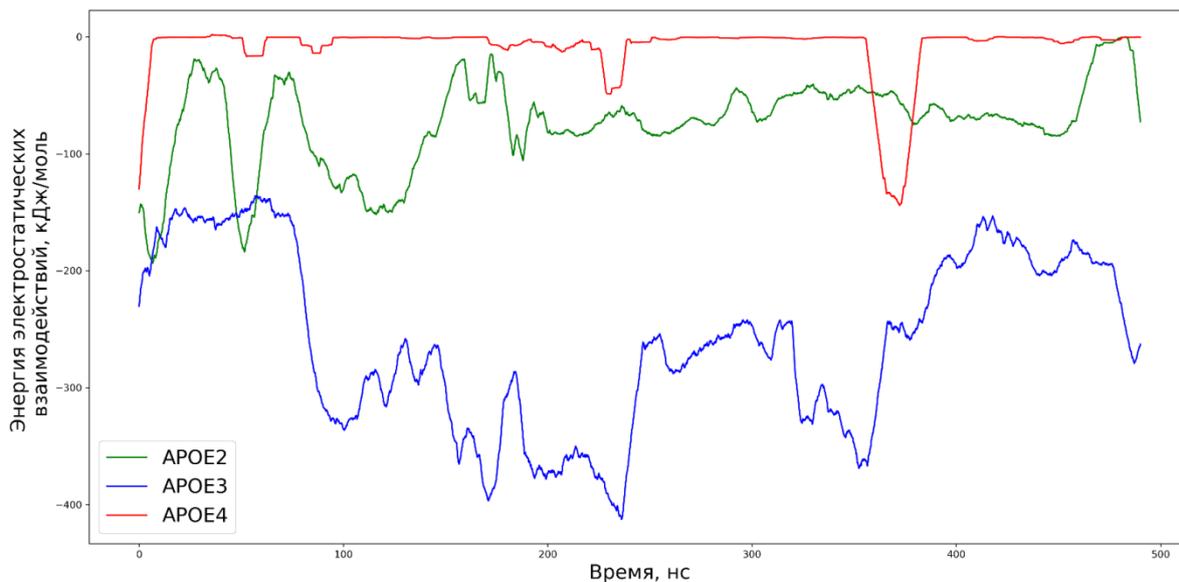


Рис. 7. Приложение. Скользящее среднее для энергии электростатических взаимодействий между N- и С-концевой α -спиралями липид-связывающего сайта изоформ АпоЕ.