

基于结合位点的辅酶 A 结合蛋白家族的分类

樊迪[§] 刘振明^{§,*} 金宏威 张亮仁^{*}

(北京大学药学院, 天然药物及仿生药物国家重点实验室, 北京 100191)

Classification of Coenzyme-A Binding Proteins Based on Co-Factor Binding Modes

FAN Di[§] LIU Zhen-Ming^{§,*} JIN Hong-Wei ZHANG Liang-Ren^{*}

(State Key Laboratory of Natural and Biomimetic Drugs, School of Pharmaceutical Sciences, Peking University,

Beijing 100191, P. R. China)

*Corresponding authors. ZHANG Liang-Ren, Email: liangren@bjmu.edu.cn; Tel: +86-10-82802567. LIU Zhen-Ming, Email: zmliu@bjmu.edu.cn; Tel: +86-10-82805514.

[§]These authors contributed equally to this work.

Supplementary Materials

说明：

- 1、 此为 POCKET2 软件之计算结果。
- 2、 共 66 个蛋白，72 个特征变量。
- 3、 蛋白质 33 个一组，分两页显示，每页显示 8 个特征变量。
- 4、 72 个特征变量用编号表示，1~60 为氢键作用，61~72 为疏水作用。
- 5、 氢键作用中，三个为一组，分别表示 POCKET2 输出文档中的 A、A/D、D 三种作用类型。
- 6、 数值上，0 表示无此类型的相互作用，非 0 数值越大表示作用越强。

	1	2	3	4	5	6	7	8
1bo4	1.08	0	0	1.08	0	0	0	0
1cm0	0	0	0	0	0	0	0	0
1ebl	0	0	0	1.33	0	0	1.08	0
1f7l	0	0	0	0.96	0	0	0	0
1fy7	0	0	0	0.69	0	0	0	0
1h16	0	0	0	0	0	0	0	0
1h1t	0	0	0	0.9	0	0	0	0
1h9g	0	0	0	0.85	0	0	0.85	0
1hnd	0	0	0	1.12	0.57	0	0.71	0
1hv9	0.68	0	0	0.68	0	0	0	0
1ixe	0	0	0	0.57	0	0	1.07	0
1khr	0.26	0.85	0	0	0	0	0	0
1kqa	0	0	0	0.43	0	0	0	0
1m4i	0	0	0.75	1	0	0.64	0	0
1mja	0	0	0	0.9	0	0	0	0
1mzj	0	0	0	1	0	0	0	0
1ndi	0	0	0	0	0	0	0	0
1qr0	0	0	0	0	0	0	0	0
1qsn	0	0	0	0.64	0	0	0	0
1s7n	0	0	0	1	0	0	0	0
1sst	0.22	0	0	0	0	0	0	0
1wlv	0	0	0.22	0	0	0	0	0
2a4n	0	0	0	0.79	0	0	0.85	0
2af4	0	0	0	1.07	0	0	0	0.43
2c43	0	0	0	1.33	0	0	0	0
2cnt	0.57	0	0	1	0	0	0	0
2cts	0	0	0	1.33	0	0	0.8	0
2d3m	0.43	0	0	1	0	0	0	0
2eft	0	0	0	0.57	0	0	0.85	0
2fy4	0	0	0	0	0	0	0	0
2gq3	0	0	0	1.14	0	0	0	0
2h7c	0	0	0	0	0	0	0	0
2ii4	0.64	0	0	0	0	0	0.64	0.85

	1	2	3	4	5	6	7	8
2jzbz	0	0	0	1.14	0	0	0	0
2o28	0	0	0	0	0	0	0	0
2ozg	0.87	0	0	1	0	0	0	0
2pfr	0	0	0	0	0	0	0	0
2pr1	0	0	0	0.85	0	0	0	0
2q4y	0	0	0	2.09	0	0	0	0
2qx1	0	0	0	1	0.47	0.85	0	0
2v1o	0	0	0	1.12	0	0	0	0
2vfc	0	0	0	1	0	0	0	0
2vhe	0	0	0	0	0	0	0	0
2zba	0.64	0	0	0.85	0	0	0	0
1dqa	0	0	0	1	0	0	1	0
1nl7	0	0	1.27	0.79	0	0	0	0
1p5r	0	0	0	1.15	0	0	0	0
1pg4	0.99	0	0	0.79	0	0	0	0
1q4s	0	0	0	1	0	0	0	0
1qfl	0	0	1.07	0.22	0	0	0	0
1r31	0.58	0	0	0.79	0	0	0.85	0
1vpm	0	0	0	1.28	0	0	0	0
1wl4	0	0	0	0.58	0.43	0	0	0
1xvt	0	0.75	0	1.01	0	0	0	0
1y7u	0	0	0	1.49	0	0	0	0
1yli	0	0	0	1.49	0	0	0	0
2f2s	0	0	0	0	0	0	0	0
2ibu	0	0	0	0	0.57	0	0	0
2jib	0	0.76	0	0.85	0.76	0	0	0
2oas	0	0	0	1	0	0	0	0
2p2f	0	0	0	1	0	0	0	0
2p8u	0.85	0	0	0	0	0	0.85	0
2scu	0	0	0	0	0	0	0	0
2tdt	0	0	0	0	0	0	0	0
2vjm	0	0	0	0.57	0	0	0	0.85
3b7k	0	0	0	1.7	0	0.64	0.62	0

	9	10	11	12	13	14	15	16
lbo4	0	0	0	1	0	0	0	1.08
lcm0	0	0	0	0	0	0	0	0.64
lebl	0.8	0	0	1.05	0	0	0	0
lf7l	0	0	0	0	0	0	0	0
lfy7	0	0	0	0	0	0	0	0.88
lh16	0	0	0	0	0	0	0	0
lh1t	0	0	0	0.88	0	0	0	0
lh9g	0	0	0	0	0	0	0	0
lhnd	0	0	0	0	0	0	0	0
lhv9	0	0	0	0	0	0	0	0
lixе	0	0	0	0.73	0	0	0	0
lKHR	0	0	0	0.57	0	0	0	0
lkqa	0	1	0	0.57	0	0	0	0
lm4i	0	0	0	0	0	0	0	0
lmja	0	0	0	0	0	0	0	0
lmzj	0	0	0	0	0	0	0	0
lndi	0	0.57	0	1.7	0	0	0	0.85
lqr0	0	0	0	0	0	0	0	0
lqsn	0	0	0	0	0	0	0	0.57
ls7n	0	0	0	0	0	0	0	0
lsst	0	0	0	1	0	0	0	0
lwlv	0	0	0	0	0	0	0	0
2a4n	0	0	0	0	0	0	0	0.85
2af4	0	0	0	1.43	0	0	0	0
2c43	0	0	0	0	0	0	0	0
2cnt	0	0	0	0	0	0	0	0
2cts	0	0	0	0	0	0	0	0
2d3m	0	0	0	0	0	0	0	0
2eft	0	0	0	0	0	0	0	0
2fy4	0	0.64	0	1.13	0	0	0	0.64
2gq3	0	0	0	0.87	0	0	0	0
2h7c	0	0	0	1.15	0	0	0	0
2ii4	0	0	0.64	0.57	0	0	0	0

	17	18	19	20	21	22	23	24
2jby	0	0	0	0	0	0	0	0
2o28	0	0.75	0	0	0.85	1.07	0	0
2ozg	0	0	0	0	0	0.87	0	0
2pfr	0	0	0	0	0	0	0	0
2pr1	0	0	0	0	0	0.64	0	0
2q4y	0	0	0	0	0	1.7	0	0
2qx1	0	0	0	0	0	0	0	0
2v1o	0	0	0	0	0	0	0	0
2vfc	0	0	0	0.49	0	0	0	0
2vhe	0	0	0	0	0	0.43	0	0.75
2zba	0	0	0	0	0	0	0	0
1dqa	0	0	0	0	1	0	0	0
1nl7	0	0	0	0	0	0	0	1.27
1p5r	0	0	0	0	0	0.79	0	0
1pg4	0	0	0	0	0	0	0	0
1q4s	0	0.55	0	0	0	0	0	0.22
1qfl	0	0	0	0	0	0	0	0
1r31	0	0	0	0	1	0	0	0
1vpm	0	0	0	0	0	0	0	0
1wl4	0	0	0	0	0	0	0	0
1xvt	0	0	0	0	1.15	0	0	0
1y7u	0	0	0	0	0	0	0	0
1yli	0	0	0	0	0	0	0	0
2f2s	0	0	0	0	0	0	0	0
2ibu	0	0	0	0	0	0	0	0
2jib	0	0.85	0	0	0	0	0	0.55
2oas	0	0	0	0	0	0.64	0	0
2p2f	0	0	0	0	0	0	0	0
2p8u	0	0	0	0	0	0	0	0
2scu	0	0	0	0	0.57	0	0	0
2tdt	0	0	0	0	0	0	0	0
2vjm	0	0	0	0	0	0	0.85	0
3b7k	0	0	0	0	0	1.07	0	0

	25	26	27	28	29	30	31	32
lbo4	0	0	0	1.08	0	0	0	0
lcm0	0	0	0	0	0	0	0	0
lebl	0	0	0	0	0	0	0	0
lf7l	0.96	0	0	0	0	0.75	0	0
lfy7	0	0	0	0	0	0	0	0
lh16	0	0	0	0	0	0	0	0
lh1t	0	0	0	0	0	0	0	0
lh9g	0	0.9	0	0	0	0	0	0
lhnd	0	0	0	0	0	0	0	0
lhv9	0	0	0	0	0	0	0	0
lixе	0	0	0	0	0	0.85	0	0
lchr	0	0	0	0	0	0	0	0
lkqa	0	0	0	0	0	0	0	0
lm4i	0	0	0	0	0	0	0.69	0
lmja	0	0	0	0	0	0	0	0.85
lmzj	0	0	0	0	0	0	0	0
lndi	1.22	0	0	0	0	0	0	0
lqr0	1.36	0	0	0	0	0	0	0
lqsn	0	0	0	0	0	0	0	0
ls7n	0	0	0	0	0	0	0	0
lsst	0	0	1	0	0	0	0	0
lwlv	0	0	0	0	0	0	0	0
2a4n	0	0	0	0	0	0	0	0
2af4	0	0	0	0	0	0	0	0
2c43	1.7	0	0	0	0	0	0	0
2cnt	0	0	0	0	0	0	0	0
2cts	0	0	0	0	0	0	0	0
2d3m	0	0	0	0	0	0	0	0
2eft	0	0	0	0	0	0	0	0
2fy4	1.18	0	0	0	0	0	0	0
2gq3	0	0	0	0	0	0	0	0
2h7c	0	0	0	0	0	0	0	0
2ii4	0	0	0	0	0.85	0	0	0

	33	34	35	36	37	38	39	40
lbo4	0	0	0	0	0	0	0	0
lcm0	0	1.07	0	0.99	0	0	0	0
lebl	0	0	0	0	0	0	0	0
lf7l	0	0.9	0	0	0	0	0	0
lfy7	0	0.97	0	0	0.69	0	0	0
lh16	0	1.36	0	0	0	0	0	0
lh1t	0	0	0	0	0.55	0	0	0
lh9g	0	0	0	0	0	0	0	0
lhnd	0	0	0	0	0	0	0	0
lhv9	0	0	0	0	0	0	0	0
lixr	0	0	0	0	1.07	0	0.85	0
lchr	0	0.26	0	0	0	0	0	0
lkqa	0	0.22	0	0	0	0	0	0
lm4i	0	0	0	0	0	0	0	0
lmja	0	0.64	0	0	0.9	0	0	0
lmzj	0	0.57	0	0	0	0	0	0
lndi	0	0.87	0	0	0	0	0	0
lqr0	0	1.36	0	0	0	0	0	0
lqsn	0	0	0	0	0	0	0	0
ls7n	0	0	0	0.75	0.89	0	0	0
lsst	0	0.79	0	0	0	0	0	0
lwlv	0	0	0	0	0	0	0	0
2a4n	0	0.57	0	0	0	0	0	0
2af4	1.43	0.57	0	0	0	0	0	0
2c43	0	1.7	0	0	0	0	0	0
2cnt	0	0	0	0	0	0	0	0
2cts	0.75	1.33	0	0	0	0	0	0
2d3m	0.73	0.57	0	0	0	0	0	0
2eft	0	0	0	0	0	0	0	0
2fy4	0	0.57	0	0.8	0	0	0	0
2gq3	0	1.14	0	0	0	0	0.57	0
2h7c	0	0.57	0	0	0	0	0	0.64
2ii4	0	0.57	0	0	0	0	0	0

	33	34	35	36	37	38	39	40
2jbz	0.55	0	0	0	0	0	0	0
2o28	0	1.07	0	0	0	0	0	0
2ozg	0	0.9	0	0	0	0	0	0
2pfr	0	0	0	0	0	0	0	0
2pr1	0	0.57	0	0	0	0	0	0
2q4y	0	0	0	0	0	0	0	0
2qx1	0	0	0	0	0	0	0	0
2v1o	0	1.21	0	0	0	0	0	0
2vfc	0	0.57	0	0	0	0	0	0
2vhe	0	0	0	0	0	0	0	0
2zba	0	1.43	1	0	0	0	0	0
1dqa	0	1	0	0	0	0	0	0
1nl7	0	0	0	0	0	0	0	0
1p5r	0	0	0	0	0	0	0	0
1pg4	0	0	0	0	0	0	0	0
1q4s	0	0	0	0	0	0	0	0
1qfl	0	0	0	0	0	0	0	0
1r31	0	0.57	0	0	0	0	0	0
1vpm	0	1.28	0	0	0	0	0	0
1wl4	0	0	0	0	0	0	0	0
1xvt	0	1.01	0	0	0	0	0	0
1y7u	0	0.57	0	0	0	0	0	0
1yli	0	1	0	0	0	0	0	0
2f2s	0	0.57	0	0	0	0	0	0
2ibu	0	0.57	0	0	0	0	0	0
2jib	0	0	0	0	0	0	0	0
2oas	0	0	0	0	0	0	0	0
2p2f	0	0	0	0	0	0	0	0
2p8u	0	0.57	0	0	0	0	0	0
2scu	0	1	0	0	0	0	0	0
2tdt	0	1	0	0	0.57	0	0	0
2vjm	0	0.57	0	0	0	0	0	0
3b7k	0.64	0.62	0	0	0	0	0	0

	41	42	43	44	45	46	47	48
2jbz	0	0	0	0	0	1.14	0	0
2o28	0	0	0	0	0	0	0	0
2ozg	0	0	0	0	0	0	0	0
2pfr	0	0	0	0	0	0	1.43	0
2pr1	0	0	0	0	0	0.85	0	0
2q4y	0	0	0	0	0	0	0	0
2qx1	0	0	0	0	0	0	0.47	0
2v1o	0	0	0	0	0	0	0	0
2vfc	0	0	0	0	0	0	0	0
2vhe	0	0	0	0	0	0	0	0
2zba	0	0	0	0	0	0.85	1	0
1dqa	0	0	0	0	0	0	0	0
1nl7	0	0	0	0	0	0.85	0.29	0
1p5r	0.85	0	0	0	0	0	0	0
1pg4	0	0	0	0	0	0	0	0
1q4s	0	0	0	0	0.43	0	0	0
1qfl	0	0	0	0	0	1.27	0.43	0
1r31	0	0	0	0	0	0.98	0	0
1vpm	0	0	0	0	0	1.28	0	0
1wl4	0	0	0	0	0	0	1.12	0.43
1xvt	0	0	0	0	0	0.75	0	0
1y7u	0	0	0	0	0	1.49	0	0
1yli	0	0	0	0	0	1.49	0	0
2f2s	0	0	0	0	0	0	0	0
2ibu	0	0	0	0	0	0	0.43	0
2jib	0	0	0	0	0	0	0	0
2oas	0	0	0	0	0	0	0	0
2p2f	0	0	0	0	0	0	0	0.57
2p8u	0	0	0	0	0	0	0	0
2scu	0	0	0	0	0	0.85	0	0
2tdt	0	0	0	0	0	0.57	0	0
2vjm	0.85	0	0	0	0	0	0	0
3b7k	0	0	0	0	0	1.7	0	0

	49	50	51	52	53	54	55	56
2jbz	0	0	0	0	0	0	0	0
2o28	0	0	0	0	0	0	0	0
2ozg	0	0	0	0	0	0	0	1.1
2pfr	0.85	0	0	0	0	0	0.85	0
2pr1	0	0	0	0	0	0	0	0
2q4y	1.7	0	0	0	0	0	2.09	0
2qx1	0	0	0	1	0	0	0	0
2v1o	0	0	0	0	0	0	1.21	0
2vfc	0	0	0	0	0	0	0	0
2vhe	0	0	0	0	0	0	0	0
2zba	1.43	0	0.79	0	0	0	0	0
1dqa	0	0	0	0	0	0	0	0
1nl7	0	0	0	0	0	0	0	0
1p5r	0	0	0	0	0	0	0	0
1pg4	0.99	0	0	0.72	0	0	0	0
1q4s	0	0	0	0	0	0	0	0
1qfl	1	0	0	0	0	0	0	0
1r31	0	0	0	0	0	0	0	0
1vpm	1.28	0	0.75	0	0	0	0	0
1wl4	0	0	0	0	0	0	0	0
1xvt	0	0	0	0	0	0	0	0
1y7u	1.49	0	0	0	0	0	0	0
1yli	1	0	0	0	0	0	0	0
2f2s	0	0	0	0	0	0	0	0
2ibu	0	0	0	0	0	0	0	0.57
2jib	0	0	0	0	0	0	0	0
2oas	0	0	0	0	0	0	0	0
2p2f	0	0	0	0.66	0	0	0	0
2p8u	0	0	0	0	0	0	0	0
2scu	1	0	0	0	0	0	0	0
2tdt	1	0	0	0	0	0	0	0
2vjm	0	0	0	0	0	0	0	0
3b7k	1.07	0	0	0	0	0	0	0

	65	66	67	68	69	70	71	72
lbo4	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0
lcm0	0.47	0.47	0	0.47	0	0	0.47	0.47
lebl	0.47	0	0	0.47	0	0.47	0	0
lf7l	0	0	0	0	0	0	0	0
lfy7	0.47	0	0.47	0	0	0	0	0
lh16	0	0	0.47	0.47	0	0	0	0
lh1t	0.47	0	0	0.47	0	0	0.47	0
lh9g	0.47	0	0	0	0	0	0.47	0
lhnd	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0.47
lhv9	0.47	0	0	0.47	0.47	0	0	0
lixе	0.47	0	0.47	0	0	0	0	0
lKHR	0.47	0	0	0	0	0.47	0	0
lkqa	0	0	0	0	0	0.47	0	0.47
lm4i	0.47	0	0	0	0	0	0	0.47
lmja	0.47	0	0.47	0	0	0	0	0
lmzj	0.47	0	0.47	0.47	0	0.47	0	0
lndi	0.47	0.47	0	0	0.47	0	0	0
lqr0	0	0	0	0	0	0	0	0
lqsn	0	0	0	0.47	0	0	0.47	0.47
ls7n	0	0	0	0	0	0	0	0
lsst	0.47	0.47	0	0	0	0	0	0.47
lwlv	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0.47
2a4n	0	0	0	0	0	0.47	0.47	0
2af4	0.47	0	0.47	0	0.47	0	0	0
2c43	0.47	0.47	0	0.47	0	0.47	0	0
2cnt	0.47	0	0	0	0	0	0	0
2cts	0.47	0.47	0	0	0	0	0	0.47
2d3m	0.47	0.47	0	0.47	0	0	0	0
2eft	0.47	0	0.47	0.47	0	0.47	0	0.47
2fy4	0	0.47	0	0	0	0	0	0
2gq3	0.47	0	0.47	0.47	0.47	0	0	0.47
2h7c	0.47	0.47	0.47	0.47	0	0	0	0
2ii4	0.47	0	0.47	0.47	0	0	0	0

	65	66	67	68	69	70	71	72
2jbz	0	0	0	0	0	0	0	0
2o28	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0
2ozg	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0
2pfr	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0.47
2pr1	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0
2q4y	0	0	0	0	0	0	0.47	0
2qx1	0.47	0	0	0.47	0.47	0.47	0	0.47
2v1o	0.47	0	0	0	0	0	0	0.47
2vfc	0.47	0	0.47	0.47	0	0.47	0	0.47
2vhe	0	0	0.47	0.47	0	0	0	0.47
2zba	0.47	0	0	0.47	0	0.47	0	0.47
1dqa	0.47	0	0	0	0	0	0	0.47
1nl7	0.47	0	0.47	0.47	0	0	0	0
1p5r	0	0.47	0.47	0.47	0	0	0.47	0
1pg4	0	0	0	0.47	0.47	0.47	0	0
1q4s	0	0	1	0	0	0	0	0
1qfl	0.47	0	0.47	0.47	0	0	0.47	0
1r31	0	0	0	0	0	0	0	0
1vpm	0	0	0	0	0.47	0	0	0.47
1wl4	0	0	0.47	0.47	0.47	0	0.47	0
1xvt	0	0	0	0	0	0	0.47	0
1y7u	0.47	0	0	0	0.47	0	0	0.47
1yli	0	0	0	0	0	0	0	0.47
2f2s	0.47	0	0.47	0.47	0	0	0	0.47
2ibu	0.47	0.47	0.47	0.47	0	0	0	0.47
2jib	0.47	0	0.47	0	0	0.47	0.47	0
2oas	0.47	0	0	0.47	0	0	0.47	0
2p2f	0.47	0	0	0.47	0.47	0.47	0	0
2p8u	0.47	0	0	0	0.47	0	0.47	0
2scu	0	0	0	0.47	0.47	0	0	0.47
2tdt	0	0	0	0.47	0	0	0	0.47
2vjm	0	0	0.47	0	0	0	0.47	0
3b7k	0.47	0	0	0.47	0	0	0	0.47