

7 Anhang

7.1 Protein-DNA Kontakte in $[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\rightarrow)$

Tabelle 14 Alle Kontakte mit Atomabständen kürzer 3,7 Å zwischen den $\Delta 19\omega$ -Polypeptidketten B/B' und der Heptade A8-A14 in $(\rightarrow\rightarrow)$ -DNA. Die Nummerierung der Nucleotide der Heptade kann Abb. 22 entnommen werden. Mit „***“ werden H-Brücken kürzer 3,3 Å und mit „*“ H-Brücken länger 3,3 Å gekennzeichnet.

Kette B	Atom	Nucleotid	Atom	Abstand [Å]
Thr29	C γ	C11	N4	3,63
His37	C ϵ 1	T10	O2P	3,56
His37	N ϵ 2	T10	O2P	3,55 *
Lys41	C δ	T10	O1P	3,46
Lys41	C ϵ	T10	O1P	3
Lys41	N ζ	A9	O3'	3,56 *
		T10	P	3,69
		T10	O1P	2,7 ***
Asn50	C β	A9	O1P	3,14
Asn50	O δ 1	A9	O2P	3,7 *
Val51	N	A9	O1P	3,1 ***
		A9	O2P	3,51 *
Val51	C β	A9	O2P	3,65
Lys52	N	A9	O2P	2,88 ***
Lys52	C β	A9	O2P	3,43
Lys52	C δ	A8	O1P	3,56
Lys28	N ζ	G4'	O1P	3,63 *
Thr29	C β	G4'	O6	3,32
Thr29	O γ	G4'	N7	3,29 ***
		G4'	C6	3,51
		G4'	O6	2,68 ***
Thr29	C γ	T3'	C5	3,68
		G4'	O6	3,19
Thr29	C	T3'	C5M	3,65
Thr29	O	T3'	C5M	3,53
Val30	N	T3'	C5M	3,59
Val30	C α	T3'	C5M	3,66
Arg31	C δ	G2'	N7	3,66
Arg31	N ϵ	T1'	C6	3,52
		G2'	N7	2,89 ***
		T1'	C5	3,36
		T1'	C5M	3,66
Arg31	C ζ	T1'	C5	3,66
		T1'	C5M	3,53
Arg31	NH2	T1'	O4	3,54 *
		G2'	O6	2,81 ***

Kette B'	Atom	Nucleotid	Atom	Abstand [Å]
His37	Nε2	T3'	O2P	3,13 ***
Lys41	Cδ	T3'	O1P	3,67
Lys41	Nζ	T3'	O1P	2,89 ***
Asn50	Cβ	G2'	O1P	3,48
Val51	N	G2'	O1P	2,98 ***
Val51	Cβ	G2'	O2P	3,6
		G2'	O1P	3,49
Val51	Cγ	G2'	O1P	3,61
Lys52	N	G2'	O2P	3,16 ***
Lys52	Cβ	G2'	O2P	3,68
Lys52	Cδ	T1'	O2P	3,51
Thr29	Oγ	C11	C5	3,54
		T10	C5	3,55
		T10	C5M	3,33
		C11	N4	3,2 ***
		T10	C6	3,68
Thr29	O	T10	C5M	3,55
Arg31	Cγ	T10	O4	3,51
Arg31	Cδ	T10	O4	3,32
		A9	N6	3,61

7.2 Protein-DNA Kontakte in $[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\leftarrow)$

Tabelle 15 Alle Kontakte mit Atomabständen kürzer 3,7 Å zwischen den $\Delta 19\omega$ -Polypeptidketten B/B' und der Heptade A8-T14 in $(\rightarrow\leftarrow)$ -DNA. Die Nummerierung der Nucleotide der Heptade kann Abb. 22 entnommen werden. Mit „***“ werden Wasserstoffbrücken kürzer 3,3 Å und mit „*“ H-Brücken länger 3,3 Å gekennzeichnet.

Kette B'	Atom	Nucleotid	Atom	Abstand [Å]
Thr29	Cγ	T10	O4	3,36
Arg31	Nε	A12	N6	3,53 *
His37	Cε1	T10	O2P	3,51
His37	Nε2	T10	O2P	2,68 ***
His37	Cδ	T10	O2P	3,73
Lys41	Cδ	T10	O1P	3,37
Lys41	Cε	T10	O1P	3,46
Lys41	Nζ	T10	O2P	3,8 *
		T10	O1P	3,31 *
		G9	O3'	3,59 *
Asn50	Cβ	G9	O1P	3,2
Asn50	C	G9	O1P	3,72
Val51	N	G9	O1P	2,88 ***
Val51	Cα	G9	O1P	3,67
Val51	Cβ	G9	O1P	3,43
		G9	O2P	3,54
Val51	Cγ	G9	O1P	3,52
Lys52	N	G9	O2P	2,87 ***
Lys52	Cα	G9	O2P	3,54
Lys52	Cβ	G9	O2P	3,25
Lys52	Cδ	A8	O2P	3,7
Thr29	Oγ	C4'	N4	3,26 ***
		C4'	C5	3,55
Thr29	O	T3'	C5M	3,28
Arg31	Cγ	T3'	O4	3,52
Arg31	Cδ	T3'	O4	3,34
		A2'	N6	3,6

Kette B	Atom	Nucleotid	Atom	Abstand [Å]	
Lys28	Nζ	G11	O1P	2,91	***
Thr29	Cβ	T10	C6	3,66	
		G11	O6	3,32	
Thr29	Oγ	G11	O6	2,72	***
		G11	N7	3,13	***
		G11	C6	3,48	
Thr29	Cγ	T10	C5	3,69	
		G11	O6	3,11	
Thr29	O	T10	C5M	3,56	
Val30	Cα	T10	C5M	3,66	
Val30	C	T10	C5M	3,69	
Arg31	N	T10	C5M	3,64	
Arg31	Cδ	A8	C8	3,56	
		G9	N7	3,56	
Arg31	Nε	A8	C8	3,37	
		A8	N7	3,31	*
		G9	C8	3,69	
		G9	N7	2,83	***
Arg31	Cζ	A8	N7	3,53	
Arg31	NH2	A8	N7	3,65	*
		G9	O6	2,89	***
Thr29	Cγ	C4'	N4	3,61	
His37	Cε	T3'	O2P	3,75	
Lys41	Cε	T3'	O1P	3,13	
Lys41	Nζ	T3'	O1P	3,42	*
Asn50	Cβ	A2'	O1P	3,56	
		A1'	O3'	3,65	
Val51	N	A2'	O1P	3,09	***
		A2'	O2P	3,46	*
Val51	Cα	A2'	O2P	3,64	
Val51	Cβ	A2'	O1P	3,61	
		A2'	O2P	3,35	
Val51	Cγ	A2'	O1P	3,55	
Val51	C	A2'	O2P	3,64	
Lys52	N	A2'	O2P	2,81	***
Lys52	Cβ	A2'	O2P	3,56	
Lys52	Cδ	A1'	O2P	3,6	
Lys52	Cε	A1'	O2P	3,57	

7.3 Dimer-Dimer-Kontakte

Tabelle 16: Kontakte in den Dimer-Dimer-Grenzflächen der Strukturen $[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\rightarrow)$ und $[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\leftarrow)$. Gelistet sind alle Wasserstoffbrücken und hydrophoben Kontakte zwischen den Helizes $\alpha 1$ der Ketten A' und B des Komplexes $[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\rightarrow)$ bzw. A' und B' des Komplexes $[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\leftarrow)$. Da Ile42 in letzterem eine leicht verschiedene Konformation hat, fallen mehr Kontakte unter die 3.9 Å Grenze und wurden in die Tabelle aufgenommen (Abb. 33A,B). Die „***“ kennzeichnen H-Brücken mit Abständen < 3,3 Å und „*“ potentielle H-Brücken mit Abständen > 3,3 Å.

$[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\rightarrow)$

AS-Rest	Kette	Atom	AS-Rest	Kette	ATOM	Distanz [Å]
His38	A'	CE1	...	Lys46	B O	3.56
His38	A'	NE2	...	Ala45	B O	3.30 *
			...	Lys46	B O	3.03 ***
His38	A'	CD2	...	Ala45	B O	3.63
Lys41	A'	O	...	Ala45	B CB	3.58
Ile42	A'	CG1	...	Ala45	B C	3.73
			...	Ala45	B O	3.90
Ala45	A'	CB	...	Lys41	B O	3.88
			...	Ala45	B CB	3.56
Ala45	A'	O	...	His38	B NE2	3.09 ***
			...	His38	B CD2	3.49
Lys46	A'	CE	...	Lys46	B NZ	3.38
Lys46	A'	NZ	...	Lys46	B NZ	3.56 *
Lys46	A'	C	...	His38	B NE2	3.88
Lys46	A'	O	...	His38	B CE1	3.55
			...	His38	B NE2	3.14 ***

$[\Delta 19\omega_2]_2-(\rightarrow\leftarrow)$

AS-Rest	Kette	Atom	AS-Rest	Kette	ATOM	Distanz [Å]
His38	A'	CE1	...	Lys46	B'O	3.72
His38	A'	NE2	...	Ala45	B'O	3.34 *
			...	Lys46	B'O	3.14 ***
His38	A'	CD2	...	Ala45	B'O	3.62
Lys41	A'	O	...	Ala45	B'CB	3.77
Ile42	A'	CD1	...	Lys46	B'CA	3.26
			...	Lys46	B'N	3.42
			...	Lys46	B'CG	3.75
			...	Ala45	B'O	3.44
			...	Ala45	B' B'	3.51
Ala45	A'	CB	...	Lys41	B'O	3.80
			...	Ala45	B'CB	3.74
Ala45	A'	C	...	Ile42	B'CD1	3.47
Ala45	A'	O	...	Ile42	B'CD1	3.42
			...	His38	B'NE2	3.20 ***
			...	His38	B'CD2	3.66
Lys46	A'	N	...	Ile42	B'CD1	3.35
Lys46	A'	CA	...	Ile42	B'CD1	3.23
Lys46	A'	CE	...	Lys46	B'NZ	3.51
Lys46	A'	NZ	...	Lys46	B'NZ	3.42 *
Lys46	A'	O	...	His38	B'CE1	3.49
			...	His38	B'NE2	3.09 ***