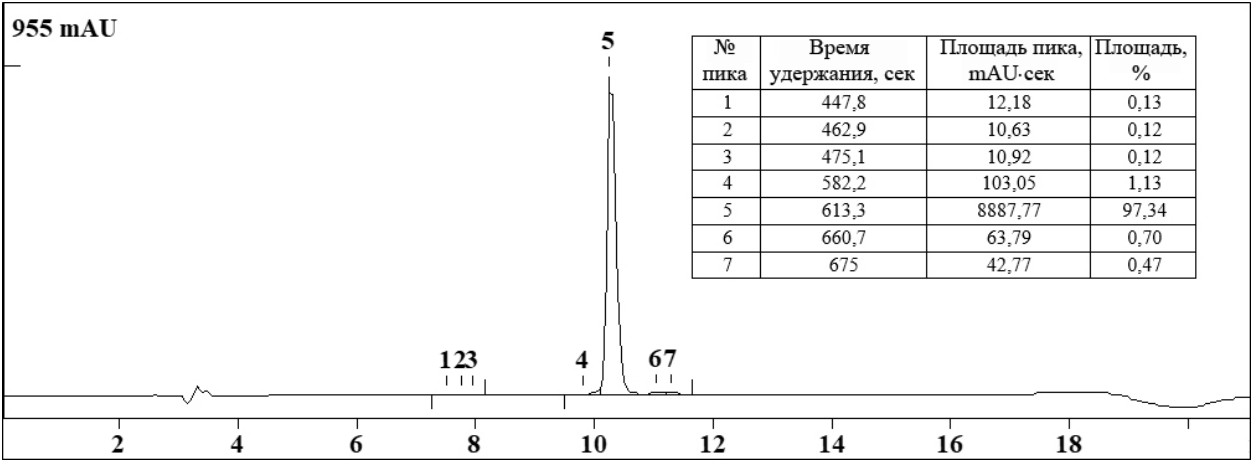
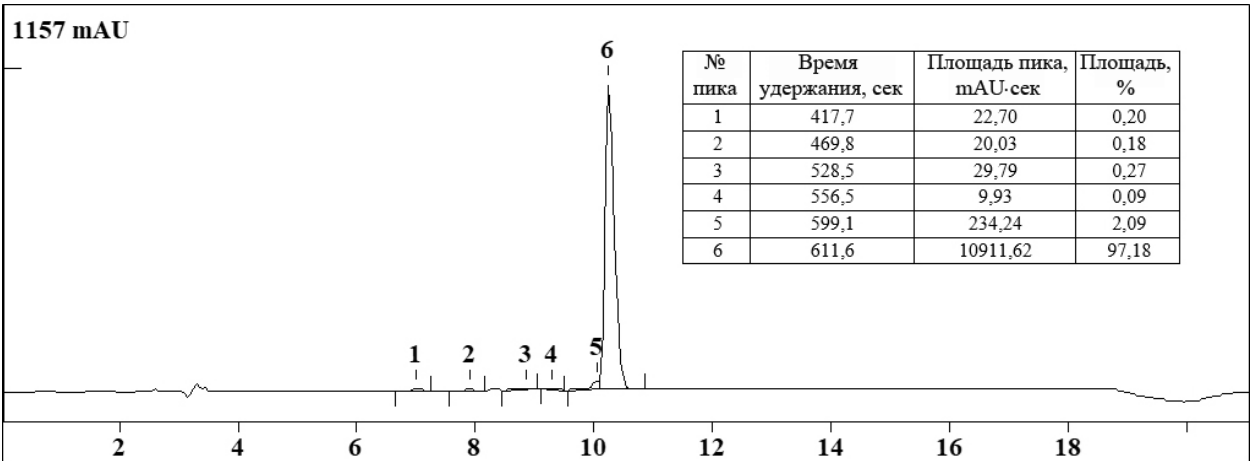


ПРИЛОЖЕНИЕ

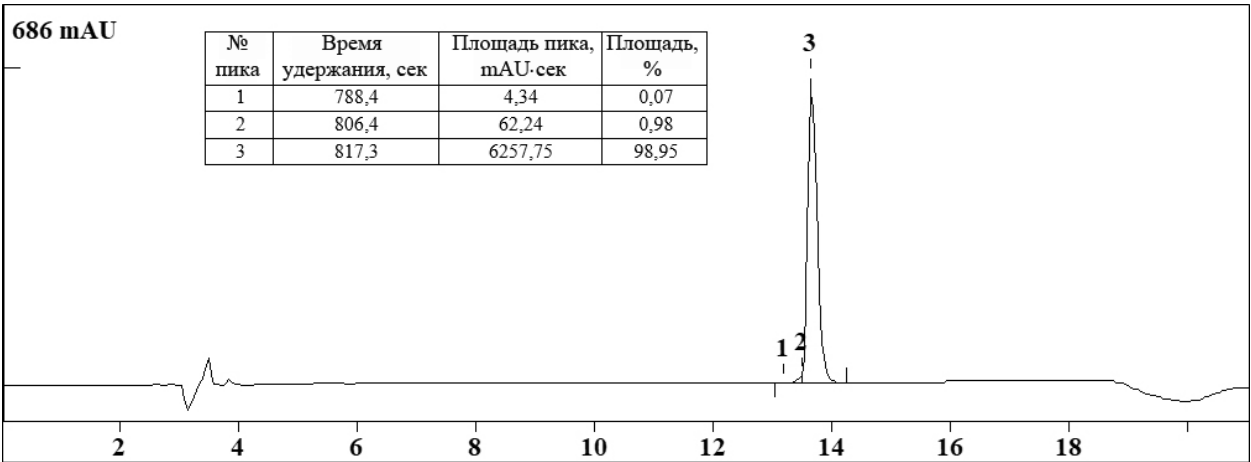
а



б



в



Время удержания, мин

Рис. П1. Результаты аналитической ОФ ВЭЖХ синтезированных пептидов.

Хроматограммы получены после проведения ОФ ВЭЖХ очищенных пептидов на колонке Luna C-18 250 x 4,6 мм, диаметр 5 мкм. Растворитель А: вода, содержащая 0,1% ТФУ; растворитель В: ацетонитрил, содержащий 0,1% ТФУ. Градиент: 5-70 % фазы В за 20 мин; скорость потока – 1 мл/мин; температура – 25 °С; детекция при 220 нм. *а* – С3f; *б* – С3f[N/K]; *в* – С3f[N/S]

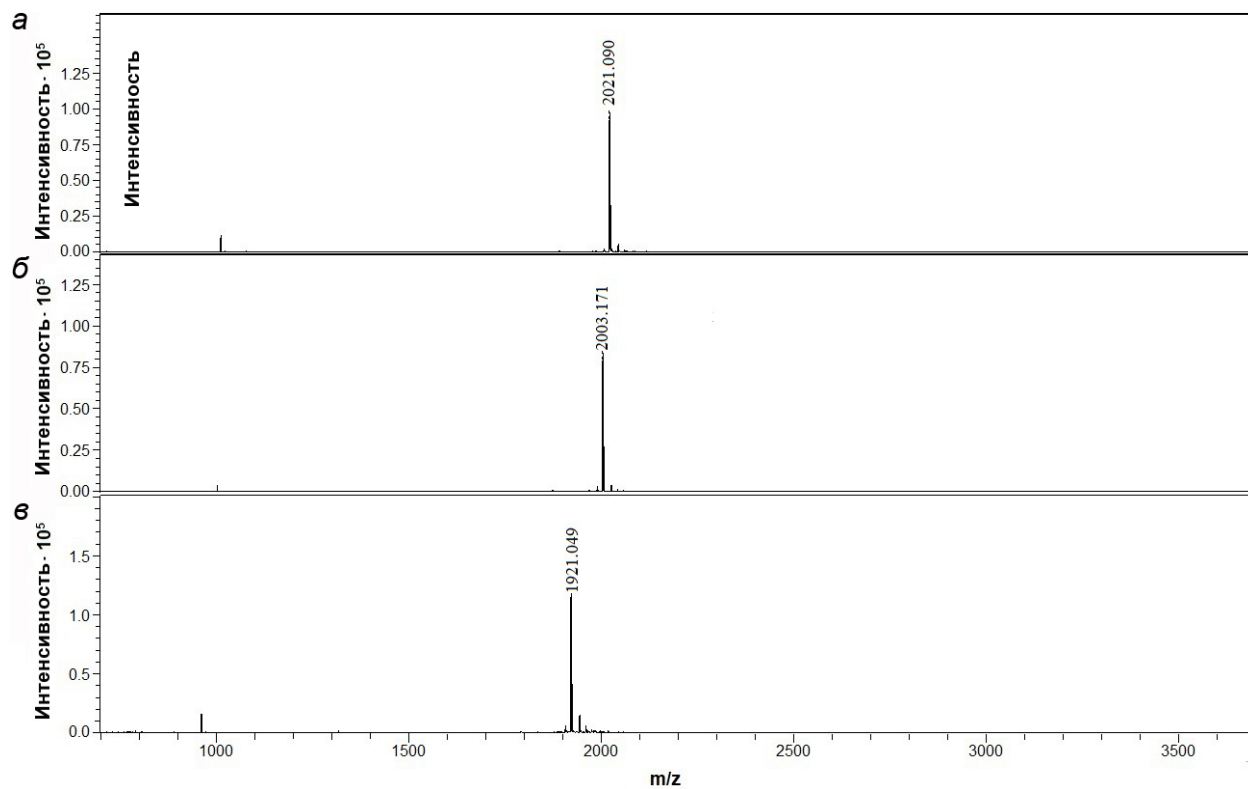


Рис. П2. Результаты MALDI TOF масс-спектрометрии синтезированных пептидов. В качестве матрицы использовали 2,5-дигидроксibenзойную кислоту. *a* – C3f; *b* – C3f[H/K]; *c* – C3f[H/S]

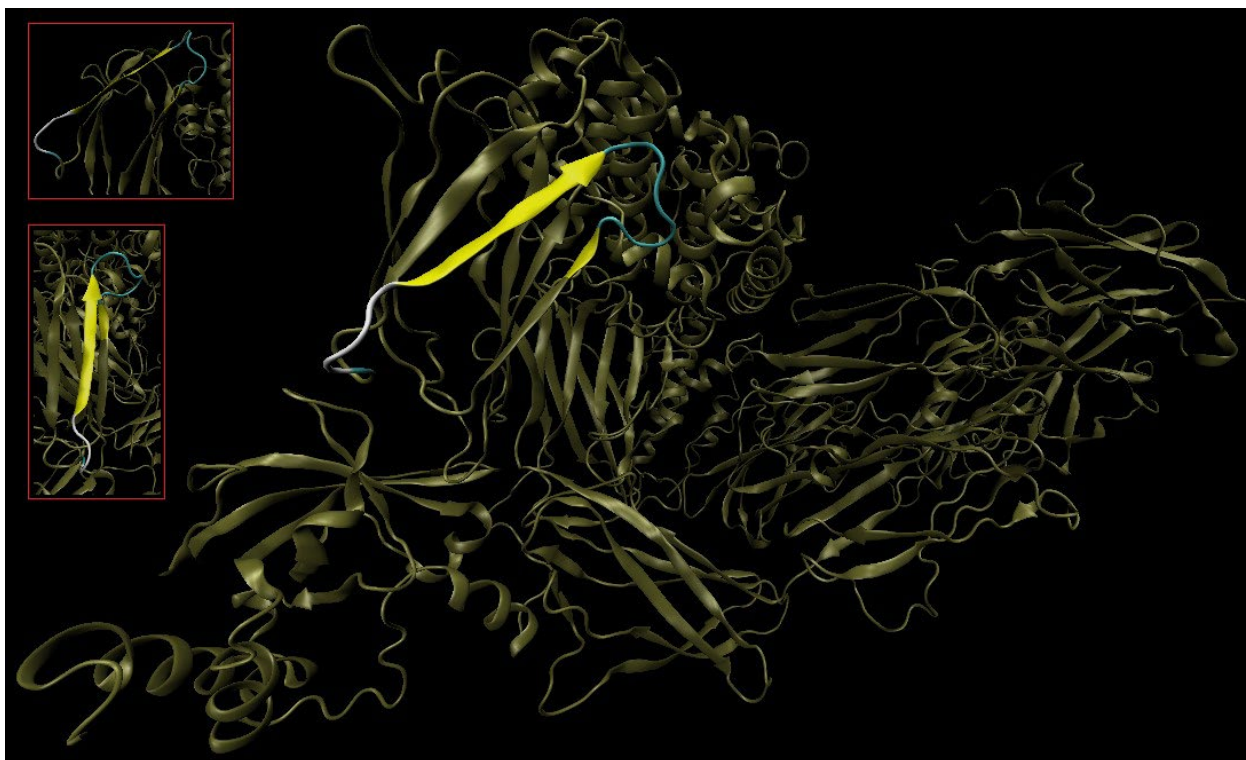


Рис. ПЗ. Расположение фрагмента C3f в молекуле C3 (Protein Data Bank ID 2A73).

Последовательность C3f показана белым (SSK), желтым (ITHRIH), голубым (WESASL) и снова желтым (LR)

Таблица П1. Результаты предсказания наличия β -поворота в молекуле C3f сервером NetTurnP

Амино-кислота	Предсказание β -поворота	Тип β -поворота								
		I	I'	II	II'	IV	VIII	VIb	VIa1	VIa2
S	0.236	0.346	0.173	0.156	0.225	0.246	0.505	0.165	0.163	0.281
S	0.292	0.354	0.129	0.189	0.191	0.272	0.561	0.174	0.143	0.253
K	0.313	0.391	0.111	0.199	0.169	0.263	0.577	0.184	0.134	0.23
I	0.37	0.412	0.101	0.247	0.135	0.342	0.603	0.238	0.137	0.212
T	0.348	0.342	0.11	0.237	0.11	0.373	0.55	0.193	0.142	0.204
H	0.333	0.299	0.115	0.191	0.119	0.385	0.527	0.187	0.148	0.213
R	0.329	0.279	0.125	0.212	0.124	0.403	0.49	0.171	0.168	0.227
I	0.276	0.232	0.209	0.174	0.159	0.351	0.382	0.156	0.176	0.25
H	0.312	0.327	0.202	0.18	0.209	0.361	0.366	0.174	0.202	0.286
W	0.443	0.51	0.283	0.241	0.293	0.472	0.452	0.252	0.228	0.345
E	0.448	0.528	0.317	0.264	0.308	0.472	0.465	0.259	0.253	0.347
S	0.497	0.569	0.245	0.321	0.309	0.492	0.479	0.318	0.263	0.322
A	0.513	0.568	0.193	0.325	0.221	0.478	0.499	0.305	0.212	0.276
S	0.481	0.524	0.141	0.348	0.108	0.441	0.544	0.247	0.194	0.231
L	0.454	0.49	0.117	0.325	0.086	0.427	0.554	0.279	0.185	0.226
L	0.429	0.439	0.12	0.258	0.073	0.39	0.515	0.203	0.157	0.222
R	0.384	0.397	0.153	0.278	0.086	0.345	0.496	0.209	0.206	0.245

Примечание. Жирным шрифтом показана наиболее вероятная область расположения β -поворота типа I.

Таблица П2. Предсказанные значения суммарного положительного заряда пептидов при различных значениях pH, рассчитанные с помощью пакета Peptides по шкале Ленинджера

Значение pH	C3f	C3f[H/K]	C3f[H/S]	HNP1
5,0	3,97	4,15	2,15	3,15
6,0	3,02	4,02	2,02	2,98
7,5	2,05	3,99	1,99	1,95
8,0	2,00	3,97	1,98	0,57