

Apéndice D

Datos obtenidos de la comparación entre las conotoxinas obtenidas mediante AlphaFold2 y métodos experimentales

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
A1	4	EI	58.8	76.5	1.29	1.32	1.93	1.93
		MII	41.2	64.7	1.17	1.33	1.51	1.51
		PIA	77.8	83.3	1.37	1.49	1.96	1.96
		PnIB-RX	47.1	58.8	0.72	0.84	0.95	0.95
A2	1	EI	47.4	47.4	2.50	2.47	2.74	2.74
		MII	31.6	36.8	2.50	2.58	2.95	2.95
		PIA	37.5	37.5	2.21	2.20	2.98	2.98
	3	EI	47.4	47.4	2.17	2.18	2.63	2.63
		MII	31.6	36.8	2.21	2.28	2.74	2.74
		PIA	37.5	37.5	1.87	1.85	2.73	2.73
A5	1	BuIA	37.5	37.5	2.46	2.42	3.06	3.06
		BuIA-RX	37.5	37.5	2.70	2.65	2.62	2.62
		Vc1a	31.6	42.1	2.64	2.68	2.91	2.91

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
A5	2	BuIA	37.5	37.5	2.01	2.02	2.80	2.80
		BuIA-RX	37.5	37.5	2.19	2.26	2.38	2.38
		Vc1a	31.6	42.1	2.35	2.44	2.82	2.82
	4	BuIA	37.5	37.5	2.32	2.28	2.93	2.93
		BuIA-RX	37.5	37.5	2.57	2.53	2.63	2.63
		Vc1a	31.6	42.1	2.53	2.61	2.98	2.98
O1	1	BU8	23.3	30.0	1,13	1,20	1,57	1,57
		MVIIA	23.3	26.7	0,81	0,98	1,55	1,55
		SO-3	23.3	26.7	1,55	1,56	2,15	2,15
	2	BU8	23.3	30.0	5,86	5,86	6,36	6,36
		MVIIA	23.3	26.7	5,95	5,99	6,78	6,78
		SO-3	23.3	26.7	5,65	5,65	6,60	6,60
	3	BU8	23.3	30.0	1,12	1,25	1,49	1,49
		MVIIA	23.3	26.7	0,83	1,01	1,62	1,62
		SO-3	23.3	26.7	1,57	1,60	2,16	2,1

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
O1	4	BU8	23.3	30.0	3,90	3,63	6,08	6,08
		MVIIA	23.3	26.7	3,83	3,57	6,03	6,03
		SO-3	23.3	26.7	8,63	8,48	8,84	8,84
	5	BU8	23.3	30.0	6,68	6,64	7,09	7,09
		MVIIA	23.3	26.7	6,76	6,74	7,51	7,51
		SO-3	40.6	40.6	6,31	6,30	7,12	7,12
O3	1	BU8	32.3	35.5	2,21	2,15	2,46	2,46
		MVIIA	29.0	35.5	2,34	2,26	2,78	2,78
		SO-3	40.6	40.6	2,29	2,25	2,49	2,49
	2	BU8	32.3	35.5	1,85	1,92	2,16	2,16
		MVIIA	29.0	35.5	2,07	2,09	2,49	2,49
		SO-3	40.6	40.6	2,33	2,34	2,52	2,52
	3	BU8	20.0	20.0	1,46	1,45	1,72	1,72
		MVIIA	23.5	23.5	1,59	1,59	2,03	2,03

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
O3	3	SO-3	23.5	29.4	2,11	2,08	2,26	2,26
		BU8	20.0	20.0	1,32	1,42	1,69	1,69
	4	MVIIA	23.5	23.5	1,49	1,54	1,96	1,96
		SO-3	23.5	29.4	1,98	2,04	2,21	2,21
		BU8	20.0	20.0	1,68	1,75	2,00	2,00
	5	MVIIA	23.5	23.5	1,91	1,93	2,35	2,35
		SO-3	23.5	29.5	2,19	2,20	2,39	2,39
O4	2	MVIIA	24.2	36.4	6.35	6.28	6.68	6.68
		SO-3	24.2	30.3	6.25	6.15	6.64	6.64
	3	MVIIA	24.2	36.4	6.41	6.34	6.74	6.74
		SO-3	24.2	30.3	6.31	6.20	6.69	6.69
	4	MVIIA	24.2	36.4	6.39	6.34	6.74	6.74
		SO-3	24.2	30.3	6.31	6.22	6.71	6.71
	5	MVIIA	24.2	36.4	6.36	6.30	6.70	6.70
		SO-3	24.2	30.3	6.26	6.17	6.66	6.66

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
O5	3	MVIIA	32.3	38.7	6.56	6.67	6.72	6.72
		SO-3	32.3	38.7	7.09	7.10	7.18	7.18
	5	MVIIA	32.3	38.7	6.70	6.79	6.76	6.76
		SO-3	32.3	38.7	7.20	7.20	7.19	7.19
O6	1	BU8	20.0	20.0	1,97	1,94	2,65	2,65
		MVIIA	23.5	23.5	1,56	1,53	1,92	1,92
		SO-3	23.5	29.4	2,09	1,96	2,60	2,60
	2	BU8	20.0	20.0	2,04	2,05	2,65	2,65
		MVIIA	23.5	23.5	1,56	1,53	1,92	1,92
		SO-3	23.5	29.4	2,09	1,96	2,60	2,60
	3	BU8	20.0	20.0	2,06	2,03	2,69	2,69
		MVIIA	23.5	23.5	1,89	1,77	2,38	2,38
		SO-3	23.5	29.4	2,25	2,11	2,72	2,72
O7	1	MVIIA	42.9	46.4	6.76	6.74	7.51	7.51
		SO-3	32.1	42.9	6.31	6.30	7.12	7.12

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
O7	3	MVIIA	42.9	46.4	0.81	0.98	1.55	1.55
		SO-3	32.1	42.9	1.55	1.56	2.15	2.15
	4	MVIIA	42.9	46.4	5.95	5.99	6.78	6.78
		SO-3	32.1	42.9	5.65	5.65	6.60	6.60
	5	MVIIA	42.9	46.4	0.83	1.01	1.62	1.62
		SO-3	32.1	42.9	1.57	1.60	2.16	2.16
O9	1	BU8	42.3	42.9	4.57	4.40	5.54	5.54
		MVIIA	42.9	46.4	3.87	3.75	4.90	4.90
		SO-3	42.9	46.4	4.14	4.08	4.74	4.74
	2	BU8	32.1	42.9	4.56	4.39	5.38	5.38
		MVIIA	32.1	42.9	3.88	3.76	5.07	5.07
		SO-3	39.3	42.9	4.17	4.11	4.94	4.94
	3	BU8	39.3	42.9	4.49	4.37	5.15	5.15
		MVIIA	42.9	46.4	3.87	3.75	5.03	5.03

Conotoxina	Modelo	Identificador PDB	Identidad %	Similaridad %	RMSD			
					Alpha Carbons	Backbone	Heavy	All
O9	3	SO-3	32.1	42.9	4.15	4.09	4.89	4.89
		BU8	32.1	42.9	4.55	4.38	5.38	5.38
	4	MVIIA	39.3	42.9	3.86	3.73	5.03	5.03
		SO-3	39.3	42.9	4.16	4.09	4.90	4.90
O10	1	MVIIA	20.9	25.6	3.65	3.56	3.85	3.85
		SO-3	16.3	23.3	3.74	3.65	3.82	3.82
	2	MVIIA	20.9	25.6	3.64	3.56	3.80	3.80
		SO-3	16.3	23.3	3.77	3.68	3.86	3.86
	3	MVIIA	20.9	25.6	3.66	3.56	3.81	3.81
		SO-3	16.3	23.3	3.79	3.69	3.88	3.88
	4	MVIIA	20.9	25.6	3.65	3.55	3.83	3.83
		SO-3	16.3	23.3	3.75	3.66	3.83	3.83
	5	MVIIA	20.9	25.6	3.67	3.54	3.88	3.88
		SO-3	16.3	23.3	3.70	3.62	3.78	3.78