

### Annexe électronique 6: Prédiction des résidus constituant les poches P1 et P2 chez les CDPS

CDPS	Sous-famille	Cyclodipeptides produits <sup>a</sup>	Positions dans la poche P1 (en numérotation Albc) <sup>b</sup>								Positions dans la poche P2 (en numérotation Albc) <sup>b)</sup>						
			33	35	65	67	119	185	186	200	152	155	156	159	204	206	207
1 (KutG_00871)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	C	G	F	P	A	L	F	F	S	W	V	K	Q	V	E
2 (SSMG_06201)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	C	G	F	P	I	L	F	F	A	W	V	G	Q	V	P
3 (AUCHE_08_05160)	<b>NYH</b>	<b>cCC cCV cCA</b>	C	G	F	P	H	M	F	F	T	G	I	A	R	I	P
4 (BN6_23810)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	C	G	F	P	G	M	F	F	A	W	V	R	Q	V	G
5 (C791_7200_BIS)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	C	G	F	P	A	M	F	F	A	W	V	R	Q	V	P
6 (H074_03090)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	C	G	F	P	A	M	F	F	A	W	V	R	Q	V	A
7 (SsomD4_15357_BIS)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	C	G	F	P	M	L	F	F	A	W	V	R	Q	V	A
9 (LPE509_p00072)	<b>NYH</b>	<b>cCC</b>	L	G	F	P	M	L	F	F	C	W	V	G	Q	P	Q
8 (CodyTL_0101001466)	<b>NYH</b>	<b>cVG cVP</b>	L	G	F	M	I	I	W	F	A	S	I	Q	D	P	L
YvmC-BLI	<b>NYH</b>	<b>cLL cLx</b>	L	G	L	A	F	F	F	L	M	A	A	G	R	W	K
YvmC-BTH	<b>NYH</b>	<b>cLL cLx</b>	I	G	L	A	F	F	F	L	M	A	A	G	K	W	E
YvmC-BSU	<b>NYH</b>	<b>cLL cLx</b>	L	G	L	A	F	F	F	L	M	E	A	G	R	W	K
Plu0297	<b>NYH</b>	<b>cLL cLx</b>	L	G	L	P	F	F	Y	L	M	Q	A	G	R	W	S
Jk0923	<b>NYH</b>	<b>cLL cLx</b>	I	G	L	P	I	A	Y	L	M	A	A	S	T	W	P
13 (Marme_0276)	<b>NYH</b>	<b>cLL cLF</b>	F	G	L	P	F	F	Y	L	M	Q	A	G	R	W	P
pSHaeC06	<b>NYH</b>	<b>cLL cLx</b>	I	G	L	A	F	F	F	M	M	Q	A	S	A	W	E
21 (Dmas2_11124)	<b>XYP</b>	<b>cLL cLx</b>	I	G	V	S	W	A	I	L	L	S	H	K	S	E	L
47 (SSMG_00951)	<b>NYH</b>	<b>cWW</b>	V	G	I	P	M	F	F	N	M	E	V	A	Q	L	P
42 (K530_34281)	<b>NYH</b>	<b>cWW</b>	L	G	I	P	L	L	C	H	A	K	A	S	Q	I	P
Amir_4627	<b>NYH</b>	<b>cWW</b>	V	G	V	P	M	F	F	N	M	V	V	L	R	L	P
14 (SCAT_0901_BIS)	<b>NYH</b>	<b>cWW</b>	V	G	V	P	L	F	F	C	M	A	A	S	K	V	P
48 SCAT_0198	<b>NYH</b>	<b>cWW</b>	V	G	V	P	M	F	F	C	M	E	A	A	R	I	P
44 (PFL_1389)	<b>XYP</b>	<b>cLE</b>	V	<b>A</b>	V	A	W	I	I	V	T	V	F	R	Q	M	T
36 (VIBR0546_16848)	<b>XYP</b>	<b>cLE cLA cLP cLx</b>	I	<b>A</b>	M	G	W	A	I	I	T	T	F	R	Q	M	S

37 (Bcep18194_C7320)	<b>XYP</b>	<b>cAE</b>	L	<b>L</b>	G	A	W	I	I	I	T	V	F	R	K	M	T
38 (GOEFS_047_00070)	<b>XYP</b>	<b>cAE</b>	I	<b>L</b>	A	A	W	I	I	V	T	R	F	R	Q	I	S
39 (O3I_35936)	<b>XYP</b>	<b>cAE cAA</b>	V	<b>L</b>	A	A	W	I	I	V	T	R	F	R	Q	I	S
40 (K530_11825)	<b>XYP</b>	<b>cAE</b>	I	<b>L</b>	A	A	W	I	I	V	T	K	F	R	Q	M	T
43 (PMM47T1_20098)	<b>XYP</b>	<b>cAE</b>	L	<b>L</b>	A	A	W	I	I	V	T	L	F	R	Q	M	T
28 (LLB_2968)	<b>XYP</b>	<b>cAA</b>	L	L	L	A	W	A	V	I	T	N	F	R	G	I	L
29 (FdumT_10802)	<b>XYP</b>	<b>cAA</b>	L	L	L	A	W	S	I	V	S	E	F	R	G	V	L
AlbC	<b>NYH</b>	<b>cFF cFL cFx cYx</b>	L	G	V	V	L	L	F	L	M	A	V	N	I	T	P
41 (K530_11977)	<b>NYH</b>	<b>cFF cFL cFx cYx</b>	L	G	V	V	L	L	F	L	M	A	V	N	I	T	P
Ndas_1148	<b>NYH</b>	<b>cFY cFF cYx cFx</b>	L	G	L	A	L	L	L	C	H	H	V	A	A	M	P
Rv2275	<b>NYH</b>	<b>cYY cYx</b>	V	G	V	T	M	L	F	N	L	R	F	T	Q	L	P
49 (Sven_1864)	<b>NYH</b>	<b>cYY cYx</b>	V	G	V	T	M	L	F	N	L	I	F	G	Q	L	P
16 (SSEG_10527)	<b>NYH</b>	<b>cLV cLA cVP</b>	F	G	A	P	F	F	L	F	M	G	V	T	A	P	A
33 (FdumT_11357)	<b>XYP</b>	<b>cGG</b>	L	P	L	D	W	V	M	E	N	D	F	R	S	R	N
19 (H123_18841)	<b>XYP</b>	<b>cIL cIx</b>	F	G	L	G	C	V	F	M	F	H	Y	H	G	F	S
25 (pah_c026o110)	<b>XYP</b>	<b>cPP cPx</b>	I	P	L	T	H <sup>*</sup>	L	I	Q	D	I <sup>*</sup>	S <sup>*</sup>	N <sup>*</sup>	G	P	C
26 (pc1814_BIS)	<b>XYP</b>	<b>cPP</b>	I	L	L	S	H <sup>*</sup>	I	L	Q	D	S <sup>*</sup>	A <sup>*</sup>	N <sup>*</sup>	G	S	Y
23 (CAGGBEG34)	<b>XYP</b>	<b>cFF cFL</b>	V	G	V	T	W	S	A	M	L	T	H	K	G	C	S
24 (RICGR_1344)	<b>XYP</b>	<b>cFF cFL</b>	L	G	V	T	W	I	I	I	Y	E	F	K	G	C	N
20 (Dmas2_10809_BIS)	<b>XYP</b>	<b>cFN cFP</b>	V	V	I	T	W	I	W	I	L	D	Y	K	G	K	N
17 (HMPREF9008_03529)	<b>SYQ</b>	<b>cFH</b>	F <sup>*</sup>	G <sup>*</sup>	L	A	W	V	I	C	V <sup>*</sup>	Q <sup>*</sup>	I <sup>*</sup>	R <sup>*</sup>	G	C	N
22 (Dmas2_05805)	<b>XYP</b>	<b>cYV cYP cYA cYx cFx</b>	V	I	I	T	W	I	I	Q	L	K	Y	K	G	G	N
18 (LYNGBM3L_69800)	<b>XYP</b>	<b>cAP</b>	F	I	L	C	A	V	F	F	F	T	Y	R	G	I	K
10 (SJA_C1-32620_BIS)	<b>NYH</b>	<b>cPM cPL</b>	L	A	P	F	W	L	L	F	M	T	L	P	R	P	S
27 (A11S_1546)	<b>XYP</b>	<b>cGN</b>	C	G	D	S	W	A	H	V	D	K	F	R	G	Q	H
31 (RICGR_1349)	<b>XYP</b>	<b>cAG cAA cAP</b>	I	L	V	A	W	V	F	I	S	E	Y	R	G	V	T
30 (RICGR_0139)	<b>XYP</b>	<b>cMP cLA cMA cAF cPL</b>	I	G	A	C	W	I	I	I	S	V	F	R	E	M	T

<sup>a</sup> Le(s) cyclodipeptide(s) majoritaire(s) produit(s) par la bactérie recombinante est (sont) indiqué(s) en **gras**.

<sup>b</sup> Les divergences entre les structures secondaires prédites par HHPRED et les structures secondaires observées dans les structures cristallographiques sont indiquées par un astérisque.

Les encadrements en orange regroupent les résidus de la poche P1 utilisés pour créer le motif de séquence pour le cyclo(Ala-Xaa) et les résidus de la poche P2 utilisés pour créer le motif de séquence pour le cyclo(Xaa-Glu).