

Alignment

Template: PDB code 2HYD

Target: human P-gp

Reference: Stockner T, de Vries SJ, Bonvin AM, Ecker GF, Chiba P (2009)

Data-driven homology modelling of P-glycoprotine in the ATP-bound state

indicates fleibility of the transmembrane domains. FEBS J 276: 964-972

```

2HYD.pdb      --MIKRYLQFVKPYKYRIFATIIVGIK-FGIPMLIPLLIKAYIDGVINNHA----- 49
human_P-gp    VFSMFRYSNW--LDKLYMVVGTAAIIHGAGLPLMMLVFGEMTDIFANAGNLEDLMSNIT 58
               : **  :  *  :..  :..** : *:*:::  :  :  .  :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      -----LTTDEKVHHLTIAIGIALFIFVIVRPPIEFIRQYLAQWTSNKILYDIRKKLYN 102
human_P-gp    NRSDINDTGFFMNLEEDMTRYAYYYSGIGAGVLVAAYIQVSWCLAAGRQIHKIRKQFFH 118
               :..  .  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      HLQALSARFYA--NNQVGQVISRVINDVEQTKDFILTGLMNIWLDCTIIIIALSIMFFLD 160
human_P-gp    AIMRQEIGWFD--VHDVGLNTRLTDDVSKINEGIGDKIGMFFQSMATFFTGFIWVTRG 176
               :  .  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      VKLTLAALFIFPFYILTVYVFFGRRLKLRERSQALAEVQGFLHERVQGISVVKSF AIED 220
human_P-gp    WKLTLVILAI SPVLGLSAAVWAKILSSFTDKELLAYAKAGAVAEVLAIRTVIAFGGQK 236
               ****. * * *. * :. * : * :. * :. * * :. . * : . * . * :. :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      NEAKNFDKNTNFLTRALKHTRWNAYSFAAINTVTDIGPIIVIGVGAYLAISGSITVGTL 280
human_P-gp    KELERYNKNLEEAKRIGIKKAITANISIGAAFLLIYASYALAFWYGTTLVLSGEYSIGQV 296
               :*  :..*:  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      AAFVGYLELLFGPLRRLVASFTTLTQSFASMDRVFQLIDEDYDIKNG-VGAQPIEIKQGR 339
human_P-gp    LTVFFSVLIGAFSVGQASPSIEAFANARGAAYEIFKIIDNKPSIDSYKSGHKPDNIKGN 356
               :..  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      IDIDHVSFQYNDN-EAPILKDINLSIEKGETVAFVGMSSGGKSTLINLIPRFYDVTSGQI 398
human_P-gp    LEFRNVHFSYPSRKEVKILKGLNLKVQSGQTVALVGNSSGCGKSTTVQLMQLYDPTGMV 416
               : :  : * * * . . * . ***. ** : : . * : ** : * * * * * : : * : * * * * :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      LIDGHNIKDFLTGSLRNQIGLVQQDNILFSDTVKENILLGRP--TATDEEVVEAAKMANA 456
human_P-gp    SVDGQDIRTINVRFLREIIGVVSQEPVLFATTIAENIRYGRE--NVTMDEIEKAVKEANA 474
               : ** : * : : . ** : * : * : : ** : * : * * * * * . . * : * : * * * *
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      HDFIMNLPQGYDTEVGERGVKLSGGQKQRLSIARIFLNNPPILILDEATSALDLESESI 516
human_P-gp    YDFIMKLPKFDTLVGERGAQLSGGQKQRIARALVRNPKILLLDEATSALDTESEAVV 534
               : ** * : * : ** * * * * . : * * * * * : * * * * * : * * * * * : * * * *
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      QEALDVLSKDR TTLIVAHRLSTITHADKIVVIENGHIVETGTHRELIKQAYEHLYSIQ 576
human_P-gp    QVALDKARKGRTTIVIAHRLSTVRNADVIAFGDDGVIVEKGNHDELMKEKGIYFKLVMTQ 594
               * * * * * * * * : : * * * * * : : * * * * * * * * : : * * * * : *
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      NLMIKRYLQFVKPYKYRIFATIIVGIK-FGIPMLIPLLIKAYIDGVINNHALTTDEKVH 635
human_P-gp    TA--WRIMKLNLTWEPYFVVGVFCAIINGGLQPAFAIIFSKIIGVFTRID---DPETKR 648
               .  *  : :  .  : ..  : . ** : *  :  :  *  .  :  :  *  :
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      HLTIAIGIALFIFVIVRPPIEFIRQYLAQWTSNKILYDIRKKLYNHLQALSARFYA--NN 693
human_P-gp    QNSNLFSLFLALGIISFITFFLQGFTEGKAGEILTKRLRYMFRSMLRQDVSWFDDPKN 708
               :  :  : :  :  :  : * :  * : :  :  :  :  :  : * : : .  :  :  : *
               :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :  :

2HYD.pdb      QVGQVISRVINDVEQTKDFILTGLMNIWLDCTIIIIALSIMFFLDVKLTLAALFIFPFYI 753
human_P-gp    TTGALTTRLANDAAQVKGAGISRLAVITQNIANLGTGIIISFIYGWQLTLLLLAIVPIIA 768
    
```

. \* : : \* : \*\* . \* . \* . \* : \* \* : . : . : \* \* : . : \*\*\* \* \* . \* :

2HYD.pdb LTVYVFFGRLRKLTRERSQALAEVQGFLHERVQGISVVKSFAIEDNEAKNFDKKNNTNFLT 813  
human\_P-gp IAGVVEMKMLSGQALKDKKELEGAGKIATEAIENFRTVVSLTQEKFQFEHMYAQLQVPYR 828  
:: \* : \* : : : \* . : \* :::: . \* \*:: \*:: : : :

2HYD.pdb RALKHTRWNAYSFAAINTVTDIGPIIVIGVGAYLAISGSITVGTLAAFVGYLELLFGPLR 873  
human\_P-gp NSLRKAHIFGITFSFTQAMMYFSYAGCFRFGAYLVAHKLMSFEDVLLVFSAVVFGAMAVG 888  
.:\*::::: . :\*: ::: :. : : .\*\*\*\*. :. : . . . : : .:

2HYD.pdb RLVASFTTLTQSFASMDRVFQLIDEDYDIKNG-VGAQPIEIKQGRIDIDHVSFQYNDN-E 931  
human\_P-gp QVSSFAPDYAKAKISAAHIIMIEKTPLIDSYSTEGLMPNTLEGNVTFGEVFNYPTRPD 948  
:: : . ::: \* ::: :\*: : \*.. . . : :\*: :. \* \*:\* . :

2HYD.pdb APILKDINLSIEKGETVAFVGMSSGGKSTLINLIPRFYDVTSGQILIDGHNIKDFLTGSL 991  
human\_P-gp IPVLQGLSLEVKKGQTLALVGSSGCGKSTVVQLLERFYDPLAGKVLLDGKEIKRLNVQWL 1008  
\* . \* . : . \* . : . \* . \* . \* . \* \* \* \* \* : : \* : \* \* \* : \* : \* . \* \* : . \*

2HYD.pdb RNQIGLVQQDNILFSDTVKENILLGRP--TATDEEVVEAAKMANAHDFIMNLPQGYDTEV 1049  
human\_P-gp RAHLGIVSQEPILFDCSIAENIAYGDNRSRVVSQEEIVRAAKEANIHFIESLPNKYSTKV 1068  
\* : : \* . \* . \* : \* \* . : : \* \* \* \* . . . : \* \* : \* . \* \* \* \* \* \* \* \* . \* \* : \* . \* : \*

2HYD.pdb GERGVKLSGGKQRLSIARIFLNNPPIILILDEATSALDLESESIIQEALDVLKDRRTLI 1109  
human\_P-gp GDKGTQLSGGKQRIAIARALVRQPHILLDEATSALDTESEKVVQEALDKAREGRTCIV 1128  
\* : : \* . : \* \* \* \* \* \* \* . : \* \* \* : : \* \* \* . \* \* \* \* \* \* \* \* \* \* \* \* \* \* : : \* \* : :

2HYD.pdb VAHRLSTITHADKIVVIENGHIVETGTHRELIKQGAYEHLYSIQNL---- 1156  
human\_P-gp IAHRLSTIQNADLIVVFQNGRVKEHGTHQQLLAQKGIYFSMVSQAGTKRQ 1179  
: \* \* \* \* \* \* \* . \* \* \* \* \* . : \* \* \* : \* \* \* : \* . \* : \* \* \* : \* . \* :