

جدول ۱: بررسی اتصال پپتیدها به اینتگرین $\alpha v\beta 3$ با اوتوداک ۴ و نرم افزار دیسکاوری استودیو

پپتید	انرژی اتصال (کیلوکالری بر مول)	اسیدآمینه‌های درگیر در اتصال (بترتیب از چپ به راست: اسیدآمینه در اینتگرین: اسیدآمینه در پپتید)
ARGD	-11.98	TYR 265 : ILE 5 PHE 267: PHE 2 THR 268 : PHE 2 GLU 270 : PHE 2
CRGD	-12.16	PHE 177 : PRO 5 LYS 203 : TYR 2 LYS 203 : LEU 1 ILE 202 : TYR2 ARG 211 : PRO 5
TRGD	-10.7	ALA 252: LEU1 ALA 218 : PHE2 ASP 251 : ARG 10 ARG 245 : ASP 12 ASP 215: ARG 10 SER 123 : ARG 10 ARG 216 : PHE2 GLU 220 : ARG 10

جدول ۲: بررسی اتصال پپتیدها به اینتگرین $\alpha v\beta 6$ با اوتوداک ۴ و نرم افزار دیسکاوری استودیو

پپتید	انرژی اتصال (کیلوکالری بر مول)	اسیدآمینه‌های درگیر در اتصال (بترتیب از چپ به راست: اسیدآمینه در اینتگرین: اسیدآمینه در پپتید)
A	-8.76	ARG122 : LEU1 SER166 : ILE5 PRO164 :ASN7 PRO85 : PHE2 PRO173 :CYS3,PHE2 ILE176 :CYS3,9 VAL165 : ILE5 HIS113 :ILE5 LEU111 : ILE5
C	-10.76	HIS91: ASN4 THR190 :TYR2 THR288 :ASP7,CYS3 ALA266 :GLY6 VAL269 :ASP7 ILE268 :ASP7 TYR18:ASP7 ILE176 :TYR2 PRO164 :LEU1,TYR2 VAL165:CYS3,PRO5 HIS113 :PRO5 LEU111 :PRO5 LYS42:VAL8
T	-8.28	LYS338: ASP7 GLU316 :ASP7 ARG248: PHE2 PRO222:LEU1 ASP218 :PHE2 TYR178 :LEU1
ARGD	-11.93	ILE176: LEU1 PRO189 :PHE2 PRO164 :LEU1 GLU283: PHE2 SER285 :ASN4,ILE5
CRGD	-12.56	ILE176 :PRO5 SER166: ASP7 PRO164 :PRO5 VAL165: PRO5,CYS3 ARG122 :ASP7 HIS113: ASP7 HIS91:VAL8, CYS9,ARG10 THR288:CYS3 VAL289:LEU1 MET286 :LEU1 GLU52 :GLY11 LYS42:ASP12 TYR18 :ASP12
TRGD	-10.30	LYS338 :ASP12 THR314 :ASP12 ASP220 :ARG10 ASP256: LEU1 TYR178 :ARG10 ALA215 :CYS3 ASP218 :ARG10 ILE216 :VAL5 ARG248 :PHE2

جدول ۳: بررسی اتصال پپتیدها به اینتگرین $\alpha v\beta 8$ با اوتوداک ۴ و نرم‌افزار دیسکاور استودیو

پپتید	انرژی اتصال (کیلوکالری بر مول)	اسیدآمینه‌های درگیر در اتصال (بترتیب از چپ به راست، اسیدآمینه در اینتگرین: اسیدآمینه در پپتید)
A	-4.34	LYS96 :CYS9 PRO78 :VAL8 PRO67 :ASN6 ILE66 :ASN6
C	-8.67	MET94: GLY6,PRO5 PHE93 :GLY6 ASN92 :LEU1 ILE66:ASP7,VAL8
T	-5.11	HIS307: ASP7 LYS310 :VAL5,CYS3 LYS341: CYS9 ARG375:PHE2 LYS347 : PHE2,LEU1 ILE320 :LEU1 THR319 :LEU1 LEU313 :CYS3 PRO314: LEU1 LEU316 :LEU1
ARGD	-12.75	ASN360 :ASN6,7 ILE361: ASN7 GLY373 :ASN7 MET374:CYS9 PRO372 :ILE5,CYS3 LYS371 :ILE5 GLU375:PHE2 ARG303: ARG10
CRGD	-13.15	ASN360 :GLY6 GLY304: ASN4 ARG303 :ASN4,TYR2 PRO372:ARG10 GLU375 :ARG10
TRGD	-11.83	LYS396 :ASP7 ASP306 :ASP12 LYS308 :ARG10,ASP12 ASN352 :ASP12,CYS9,ASP7 ASN404 :ASN6,ASP7 VAL336:LEU1 ALA338: LEU1 GLU288 :ARG10 LYS369:LEU1,PHE2

جدول ۴: بررسی اتصال پپتیدها به اینتگرین $\alpha 5\beta 1$ با اوتوداک ۴ و نرم افزار دیسکآوری استودیو

پپتید	انرژی اتصال (کیلوکالری بر مول)	اسیدآمینه‌های درگیر در اتصال (بترتیب از چپ به راست، اسیدآمینه در اینتگرین: اسیدآمینه در پپتید)
A	-6.35	LYS 424 : CYC 9 GLU 435 : ASN 7 LYS 424 : ASN 7 LYS 368 : CYS 3 ASN 366 : LEU1 GLU 308 : PHE 2
C	-7.42	GLN 405 : LEU 1 TYR 380 : TYR 2 GLU 403 : TYR 2 VAL 404 : TYR 2 LYS 382 : ASN 4 GLY 401 : GLY 6 ARG 78 : ASP 7 LYS 116 : ASP7 GLU 403 : GLY 6
T	-7.13	PRO 314 : PHE 2 GLY 389 : CYS 9 TYR 377 : CYS 9 ILE 375 : LEU 1 THR 411 : ASN 4 LEU 369 : LEU 1 GLU 390 : PHE 2 THR 374 : CYS 3
ARGD	-13	GLU 347 : ASN 6 GLU 347 : ASN 7 LYS 368 : ASN 7 LYS 368 : ILE 5 ARG 317 : ASN 7 LYS 368 : CYS 3
CRGD	-13.43	ASP 68 : LEU 1 LYS 67 : LEU 1 GLN 405 : PRO 5 ILE 69 : LEU 1 LYS 67 : TYR 2 LYS 114 : ASP 7
TRGD	-11.93	LYS 67 : ASP 12 THR 112 : ASP 12 THR 112 : ASP 12 GLN 405 : CYS 3 ASN 77 : ASP 7 LYS 114 : CYS 3 ASN 72 : CYS 9 LYS 67 : GLY 11 THR 112 : CYS 3

جدول ۵: بررسی اتصال پپتیدها به اینتگرین $\alpha 6\beta 1$ با اوتوداک ۴ و نرم‌افزار دیسکآوری استودیو

پپتید	انرژی اتصال (کیلوکالری بر مول)	اسیدآمینه‌های درگیر در اتصال (به ترتیب از چپ به راست، اسیدآمینه در اینتگرین: اسیدآمینه در پپتید)
A	-7.08	ARG 102 : CYS 3 PRO 63 : ILE 5 CYS 442 : PHE 2 LYS 418 : PHE 2 ARG 102 : ASN 4 CYS 415 : PHE 2 ARG 102 : ASN 7 ASP 419 : LEU1
C	-8.48	ASP 68 : LEU1 LYS 70 : TYR 2 ASN 72 : CYS 3 THR 112 : ASN 4 PRO 96 : PRO 5 LYS 114 : PRO 5 ILE 69 : LEU 1
T	-7.75	ARG 426: CYS 9 LYS 424 : CYS 9 GLN 304 : LEU 1 LYS 368 : CYS 3 LYS 368 : VAL 5 SER 422 : VAL 8 LYS 417 : ASP 7 LYS 417 : ASN 6
ARGD	-12.24	GLU 308 : LEU 1 TYR 378 : PHE 2 TYR 378 : ARG 10 ASP 380 : CYS 9 ASP 380 : VAL 8 LYS 368 : ASP 12
CRGD	-13.06	SER 420 : CYS 3 SER 422 : CYS 3 LYS 417 : CYS 3 LYS 417 : PRO 5 LYS 368 : PRO 5 SER 370 : PRO 5
TRGD	-11.44	SER 422 : CYS 3 LYS 424 : ASP 12 ASP 419 : ASP 7 LYS 417 : ASN 4 LYS 417 : ASP 7